

UNIVERSIDAD EAFIT  
ESCUELA DE INGENIERÍA

MODELACIÓN MATEMÁTICA SIMPLE (0-D) DE UN GASIFICADOR DE BIOMASA  
DE TIPO LECHO FIJO CO-CORRIENTE, “DOWNDRAFT”

AUTOR

ANDRÉS FELIPE RAMÍREZ RESTREPO

DIRECTOR

IM. M.Sc. LUIS SANTIAGO PARÍS LONDOÑO

MEDELLÍN, 18 DE OCTUBRE DE 2016

*Este trabajo está dedicado a la memoria del profesor Yuan Kuan*

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a mis asesores M.Sc Luis Santiago Paris y Ph.D Germán Quintana, por el tiempo dedicado al desarrollo del proyecto, su apoyo, confianza y asesoría que ayudaron a mejorar mi comprensión del problema durante todo este proceso.

A la IQ Gloria Velásquez por sus intervenciones en temas cruciales que ayudaron a la solución del proyecto. Al IQ Jaime Escobar por sus asesorías en temas de diseño referentes al proyecto. A la IP. Andrea Gaviria por su constante colaboración en la gestión administrativa

Al grupo de investigación IEXS. Al IQ. Pablo Hernández, por todo lo aportado al comienzo de este proyecto que fue de vital importancia para el desarrollo y culminación del mismo.

Por último, agradezco al Departamento de Antioquia Secretaría de Agricultura y Desarrollo rural, a la Universidad Pontificia Bolivariana y a la Universidad EAFIT por el apoyo financiero durante el desarrollo del proyecto.

## RESUMEN

Durante las últimas décadas se ha producido un crecimiento significativo en la investigación sobre las biomásas, tecnologías de conversión y el uso final de los productos obtenidos. Dentro de esto se encuentra una mayor progresión en la gasificación dada la cantidad de ventajas que presenta. Simultáneamente a su desarrollo, se ha trabajado en los modelos matemáticos que permitan el entendimiento, la optimización y el manejo de este tipo de procesos. Estos modelos se clasifican en dos: Cinéticos y termodinámicos.

El presente proyecto se centra en el estudio de los modelos matemáticos. Se ha pretendido acercar los modelos al comportamiento del proceso experimental. Para ello se han desarrollado un modelo en el que se han ido incorporando gradualmente varios parámetros experimentales, hasta llegar a un modelo teórico basado en resultados experimentales de gasificación.

El modelo matemático desarrollado se basa en parámetros de entrada típicos en la gasificación como el análisis elemental de la biomasa, la humedad, la relación de equivalencia y adicionalmente se incorporó la relación de reacción con aire. Se plantearon balances de masa y energía, ecuaciones de equilibrio para predecir la composición de salida de los gases, temperatura y poder calorífica del gas producido. Todo esto para un gasificador de lecho fijo equicorriente “*Downdraft*”, considerado en estado estacionario.

Por otra parte, y para tener una visión distinta, el modelo fue resuelto utilizando el *software* EES® (*Engineering Equation Solver*). Los resultados con el modelo fueron comparados con datos experimentales de gasificadores reportados en la literatura y arrojaron resultados aceptables.

### Palabras clave

Modelación matemática, biomasa, gasificación, gasificador, reactor de lecho fijo.

## CONTENIDO

RESUMEN.....	1
1. INTRODUCCIÓN .....	2
2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	5
3. MARCO TEÓRICO .....	7
3.1 Gasificación de lecho fijo co-corriente (Downdraft).....	9
4. ESTADO DEL ARTE.....	12
4.1. Tipos de modelo.....	15
4.1.1. Modelo equilibrio termodinámico.....	15
4.1.2. Modelo cinético.....	19
5. REFERENCIAS EXPERIMENTALES DE LITERATURA TÉCNICA .....	23
5.2. Propiedades de la biomasa .....	23
5.1.1. Relación aire-combustible.....	24
5.1.2. Composición del gas producido .....	25
6. METODOLOGÍA DE DESARROLLO DEL MODELO .....	26
6.1. Propiedades relacionadas con la gasificación .....	27
6.2. Propiedades relacionadas con la biomasa .....	27
6.3. Formula química de la biomasa.....	27
6.4. Contenido de humedad.....	28
6.5. Poder calorífico .....	29
6.6. Relación de equivalencia.....	29
6.7. Formulación del modelo matemático de gasificación.....	30
6.8. Poder calorífico del gas producido.....	33
7. VALIDACIÓN.....	35
7.1. Comparación composiciones del gas .....	35
7.2. Comparación del poder calorífico inferior.....	47
8. APLICACIÓN DEL MODELO AL CASO DE LA GASIFICACIÓN DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES DE <i>SACHA INCHI</i> .....	48
9. CONCLUSIONES .....	56
10. BIBLIOGRAFÍA.....	57
ANEXO A.....	61

## LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Principales reacciones del proceso de gasificación.....	8
Tabla 2. Propiedades de la biomasa de referencia.....	24
Tabla 3. Radio de equivalencia y relación aire combustible de las referencias .....	24
Tabla 4. Composición del gas de ensayos experimentales.....	25
Tabla 5. Composición de gas de ensayos experimentales.....	25
Tabla 6. Formula química de las biomosas usadas como referencia .....	28
Tabla 11. Comparación composición en base seca de gas. ....	36
Tabla 12. Comparación composición de gas.....	42
Tabla 13. Comparación de poder calorífico inferior, eficiencia de gas frio y pérdidas de calor.....	47
Tabla 14. Análisis último y próximo de los residuos de descascarados de la sachá inchi .....	49
Tabla 15. Variables del proceso de gasificación de Sachá inchi con $\phi$ : 0,25 y MC: 8,93%.....	53
Tabla 16. Variables del proceso de gasificación de Sachá inchi con $\phi$ : 0,3 y MC: 8,93%.....	54
Tabla 17. Variables del proceso de gasificación de Sachá inchi con $\phi$ : 0,35 y MC: 8,93%.....	55

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Tipos de gasificador (Bain & Broer, 2011). .....	8
Figura 2. Funcionamiento de un reactor de lecho fijo co-corriente con perfil de temperatura (Basu, 2013). .....	10
Figura 3. Etapas proceso de gasificación (Ratnadhariya & Channiwala, 2009). .....	14
Figura 4. Posibles sub-modelos de simulación de gasificadores (Ratnadhariya & Channiwala, 2009). .....	18
Figura 5. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 12,5 y $\varphi$ : 0,375.....	37
Figura 6. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 13,8 y $\varphi$ : 0,324.....	37
Figura 7. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14 y $\varphi$ : 0,364.....	38
Figura 8. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14,7 y $\varphi$ : 0,377.....	38
Figura 9. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14,7 y $\varphi$ : 0,296.....	39
Figura 10. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 15,2 y $\varphi$ : 0,337.....	39
Figura 11. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 16 y $\varphi$ : 0,35.....	40
Figura 12. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 16 y $\varphi$ : 0,312.....	40
Figura 13. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 18,5 y $\varphi$ : 0,323.....	41
Figura 14. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,38 y $\varphi$ : 0,259.....	43
Figura 15. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,66 y $\varphi$ : 0,254.....	43
Figura 16. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,89 y $\varphi$ : 0,266.....	44
Figura 17. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,01 y $\varphi$ : 0,262.....	44
Figura 18. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,25 y $\varphi$ : 0,239.....	45
Figura 19. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,57 y $\varphi$ : 0,227.....	45
Figura 20. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,69 y $\varphi$ : 0,216.....	46
Figura 21. Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 8 y $\varphi$ : 0,237.....	46
Figura 22. Comparación de los LHV de los datos experimentales de (Barrio M. , 2002)y los predicho por el modelo.....	47
Figura 23. Residuos agroindustriales del proceso de descascarado de <i>Sacha inchi</i> .....	48
Figura 24. Relación de reacción con aire $R_{air}$ vs fracción molar $x_i$ , $\varphi$ : 0,2 y MC: 8,93%.....	50
Figura 25. Relación de reacción con aire vs fracción molar $x_i$ , $\varphi$ : 0,25 y MC: 8,93%.....	50
Figura 26. Relación de reacción con aire vs fracción molar $x_i$ , $\varphi$ : 0,3 y MC: 8,93%.....	51
Figura 27. Relación de reacción con aire vs fracción molar $x_i$ , $\varphi$ : 0,35 y MC: 8,93%.....	51
Figura 28. Temperatura de proceso vs relación de reacción con aire, a diferente $\varphi$ y MC: 8,93%...	52

## 1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha estudiado la posibilidad de darle más participación a las energías alternativas y renovables en la producción energética a nivel mundial, para suplir una demanda de energía en constante aumento causada por la alta industrialización de las ciudades y el incremento en la calidad de vida en el mundo. Las principales ventajas del uso de energías renovables es que las emisiones netas de CO<sub>2</sub> son cero y la distribución territorial es menos concentrada, lo que permite tener cierta autonomía energética. Dentro de las energías renovables se encuentra la energía solar, la eólica, hidráulica, la geotérmica y la energía de la biomasa, de todas estas la de la biomasa es la más aprovechada alrededor del mundo, y representa aproximadamente el 9.6% del consumo energético, dentro de ese porcentaje el 4% corresponde a usos tecnificados y el 5.6% a usos tradicionales (U.S. Energy Information Administration, 2015).

La gasificación aplicada a diferentes sectores, como el de químicos y fertilizantes en cual se lleva trabajando más de medio siglo en varios países, el campo de la generación energética lleva un poco más de 40 años donde países como Suecia, Alemania y Estados Unidos son pioneros en el tema (Solar Energy Research Institute, 1979). Actualmente en el mundo existen aproximadamente 686 gasificadores distribuidos en 272 plantas, se espera que la gasificación para el 2018 a nivel mundial tenga un crecimiento significativo especialmente en el continente asiático concretamente China que es el país con más plantas de gasificación en operación (Gasification Technologies Council, 2015). Se considera que el crecimiento de la tecnología a nivel mundial, es debido fundamentalmente, al aumento de la demanda energética, el incremento en los precios y la disminución de las fuentes de combustibles fósiles, principalmente el petróleo y en una menor cantidad el carbón y gas natural.

El desarrollo de estas nuevas tecnologías incluye un análisis del proceso a escala de laboratorio y la construcción de equipo a escala piloto, hasta llegar a implementar el modelo a nivel industrial. Estos prototipos también van acompañados por un planteamiento de modelos matemáticos que describen los fenómenos fisicoquímicos, termodinámicos y térmicos que ocurren dentro del gasificador. Estos modelos se utilizan en el escalamiento de equipos de mayor tamaño y en la optimización de los parámetros de operación. El reducido conocimiento de los fenómenos complejos presentes en el proceso, limita y reduce el desarrollo tecnológico a una copia o adaptación de tecnologías, lo que a veces resulta poco efectivo en el proceso de gasificación. El



uso de los modelos matemáticos permite estudiar la influencia de los parámetros que intervienen en el proceso de manera rápida y práctica.

La gasificación de biomasa es un fenómeno complejo en el que se presentan transporte de masa, difusión de masa, transferencia de momento y transferencia de energía principalmente en forma térmica de manera simultánea. Es de gran importancia determinar las condiciones de operación del equipo, que permitan obtener gases de combustible con un elevado poder calorífico. Un gas con alto poder calorífico, está en capacidad de liberar mayor cantidad de energía térmica por combustión.

La simulación del proceso de gasificación de biomasa ha tomado una gran importancia al ser una herramienta para mejorar la comprensión y entender mejor este complejo proceso. Por ende, al modelar este fenómeno de una manera más simple y clara, facilita la detección de sus puntos débiles y como controlarlos. La biomasa puede ser aprovechada de tal manera que el carbono y el hidrógeno presentes en ella sean convertidos principalmente en  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$  y  $H_2S$ , si se predijera con buena exactitud dicha composición la temperatura de salida y su poder calorífico, el modelo y la simulación sería de mucha utilidad, función para la cual es implementada la simulación.

El modelo matemático que se plantea en este trabajo se fundamenta en el planteamiento de balances elementales de masa y de energía, el modelo se solucionó mediante los balances ya dichos y utilizando constantes de equilibrio de reacciones características del proceso de gasificación, los valores de las constantes se compararon con lo que se reporta en la literatura especializada, para resolver el modelo, se utilizó el software EES (*Engineering Equation Solver*).

En el ámbito nacional la tecnología está en desarrollo creciente, solo existe reportada una planta de gasificación de biomasa para la generación de energía, localizada en Necoclí, Antioquia. Este equipo posee una potencia eléctrica nominal de 41 KVA, sin embargo, en la actualidad esta planta no está operación. Además, la Universidad Nacional sede Bogotá y la Universidad del Norte sede Barranquilla cuentan con un gasificador de lecho fijo tipo downdraft de tecnología india, estos dos gasificadores son empleados únicamente para fines académicos e investigativos. En la Universidad EAFIT actualmente se encuentra en desarrollo un proyecto para la generación energética a partir de desechos agroindustriales en la zona del Bajo Cauca Antioqueño con recursos del sistema

general de regalías de Colombia en asocio con la Universidad Pontificia Bolivariana y la Universidad Nacional de Colombia y de la Gobernación de Antioquia. El actual proyecto hace parte de ese programa de investigación.

Con el presente trabajo se desarrolla un modelo matemático funcional simple para un gasificador de biomasa tipo downdraft. Teniendo en cuenta los parámetros de entrada del combustible como es el contenido de humedad del combustible, la composición elemental, la relación de equivalencia y relación de reacción con aire. Para predecir la composición de salida y la temperatura del gas en el proceso de gasificación, el modelo planteado se resolvió con un sistema de ecuaciones no lineales. Los resultados arrojados por el modelo fueron comparados con datos experimentales reportados en la literatura técnica consultada obtenidos de ensayos realizados con diferentes biomásas en gasificadores de configuraciones similares.

## 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Los avances tecnológicos requieren la investigación de nuevas tecnologías que ayuden al mejoramiento de la sociedad, el medio ambiente y la academia. Uno de los grandes problemas de la sociedad actual es la dependencia energética de los combustibles fósiles tradicionales (carbón, gas natural y petróleo) tales fuentes energéticas generan un impacto nocivo a la salud y al medio ambiente, los recursos fósiles traen consigo problemas como el impacto ambiental en la exploración, obtención y transporte; la liberación a la atmósfera de gases de efecto invernadero al momento de su combustión (libera, entre otros, carbono, almacenado naturalmente por millones de años, en forma de  $\text{CO}_2$ ) y, además, una creciente demanda combinada con una declinante oferta da como resultado aumentos en los precios. Lo que ha llevado a que se investiguen nuevas técnicas para aprovechar los residuos o materiales orgánicos que ayuden a la generación de energía, ésta se puede convertir mediante procesos bioquímicos, termoquímicos y fisicoquímicos.

Hoy en día se busca reemplazar este tipo de combustibles y aumentar la participación de las energías alternativas y renovables en la producción de energía en el mundo, para suplir la demanda que cada vez es mayor. Dentro de las energías renovables se encuentran la solar, eólica, la biomasa y la hidráulica. Siendo la biomasa la que tiene más potencial energético tanto en países desarrollados como en vías de desarrollo.

En Colombia existen estudios sobre la generación de biomasa residual se destaca la disponibilidad para su aprovechamiento energético el bagazo de caña, la cascarilla de arroz, la cascarilla de café, la fibra de palma de aceite, residuos madereros y residuos de cosechas. Una de las tecnologías que permite el adecuado aprovechamiento de la biomasa como fuente energética es la gasificación, pues en esta la combustión se hace de forma incompleta y controlada. Sin embargo, para que la generación a partir de la gasificación de biomasa sea económicamente rentable y técnicamente viable se requiere de un equipo capaz de transformar eficientemente la energía contenida en ella. Es por esto, que se plantea que la modelación matemática del proceso es una herramienta que permite observar de una forma aproximada el desarrollo del proceso y sus posibles puntos a mejorar; llegando, entonces, a ser un medio para mejorar la eficiencia del proceso y hacer de este una solución práctica y asequible para la población.

Por lo tanto, el objetivo general que se plantea en este trabajo es desarrollar un modelo matemático simple, para la predicción de las características básicas del gas obtenido en un gasificador de biomasa de lecho fijo tipo *Downdraft*.

Como objetivos específicos se tienen:

- Plantear un modelo matemático simplificado (0-D) para el proceso de gasificación basado en balances de masa y energía y de equilibrio termodinámico.
- Solucionar el modelo matemático planteado para predecir las características del gas obtenido en el proceso de gasificación.
- Validar los resultados obtenidos en el modelo con datos y resultados experimentales de la literatura técnica de otros autores.
- Predecir las características del gas que se pueda obtener a partir de la gasificación de los subproductos agroindustriales del descascarado de la *Sacha Inchi*, utilizando el modelo planteado.

### 3. MARCO TEÓRICO

La gasificación es un proceso de transformación termoquímico donde la materia prima o combustible que puede ser carbón, madera, biomasa, residuos urbanos, entre otros, sufre una descomposición a elevadas temperaturas a través del paso por un reactor, convirtiéndolo en un gas con gran contenido energético con varias aplicación; este gas se compone principalmente de monóxido de carbono, dióxido de carbono, hidrogeno, metano, hidrocarburos pesados, agua, nitrógeno, algunas cenizas y alquitranes (Bain & Broer, 2011).

En el proceso los sólidos hacen parte de diversas reacciones con el objetivo de generar una mezcla final de gases conocida como gas de síntesis o *syngas* que puede ser usado como combustible para la generación de energía eléctrica, como precursor de productos químicos de gran valor en la industria química y petroquímica, generación de potencia y calor, producción de hidrogeno, síntesis de metanol y éter dimetil, entre otros (Basu, 2013). En la Tabla 1 se mencionan algunas de las reacciones que se llevan a cabo durante todo el proceso de gasificación

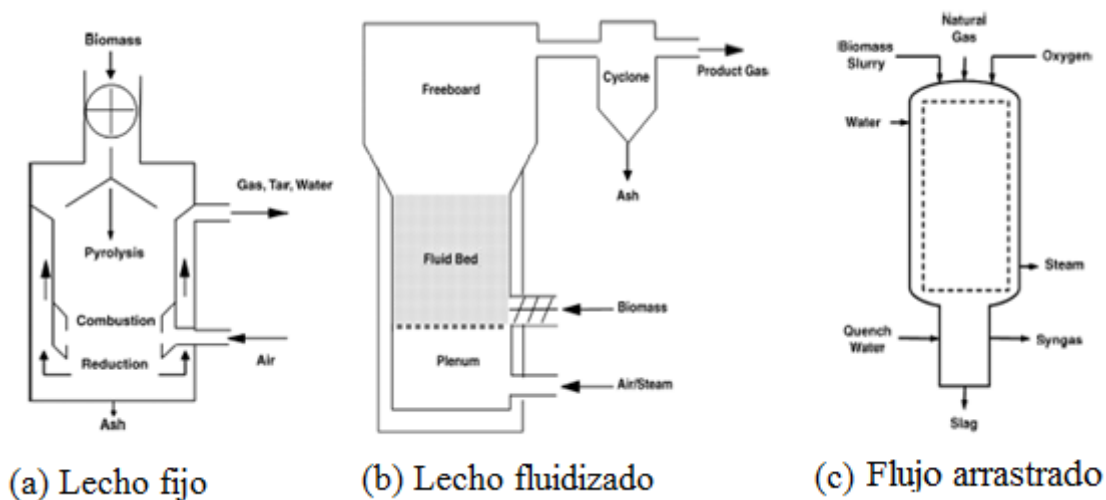
En el proceso de gasificación puede usarse diferentes tipos de agentes gasificantes, es decir un gas que se inyecta en la zona de oxidación, éste tiene una gran importancia debido a que según sea el que se utilice puede variar principalmente el poder calorífico del gas, la composición de los gases a la salida, el poder calorífico y la temperatura de salida de estos. Los gases comúnmente usados son aire ( $O_2 + 3,76 N_2$ ), oxígeno ( $O_2$ ), vapor de agua ( $H_2O$ ) o una mezcla entre ellos, el agente gasificante más usado debido a su disponibilidad y fácil adquisición es el aire, sin embargo, genera un “*syngas*” con alto contenido de nitrógeno y esto disminuye el poder calorífico. El vapor de agua y el oxígeno mejoran el rendimiento de la gasificación, disminuyen la cantidad de nitrógeno y aumenta la proporción de hidrogeno en el “*syngas*”, el mayor inconveniente que se presenta con estos dos agentes son los costos que se generan tanto para producir el vapor como para obtener el oxígeno (Basu, 2013).

Los equipos de gasificación pueden clasificarse en tres grupos de acuerdo a su principio de funcionamiento: los gasificadores de lecho fijo, gasificadores lecho fluidizado y gasificadores tipo “*entrained-flow*” o *flujo arrastrado* (Figura 1).

**Tabla 1.** Principales reacciones del proceso de gasificación.

Oxidación heterogénea		$\Delta H$ [kJ/mol]
Combustión	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	-394
Combustión incompleta	$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	-111
Reacciones heterogéneas en equilibrio		
Reacción de Boudouard	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	173
Reacción agua-gas	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	131
Reacción de metanación	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	-72
Oxidación homogénea		
Oxidación del monóxido de carbono	$CO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO_2$	-283
Metanización	$CO + 3H_2 \rightarrow CH_4 + H_2O$	-206
Oxidación del hidrógeno	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	-242
Oxidación del metano	$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	-519
Reacciones homogéneas en equilibrio		
Reacciones agua-gas	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	-41
	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	-206

**Fuente:** (Basu, 2013)



**Figura 1.** Tipos de gasificador (Bain & Broer, 2011).

Lecho burbujeante, lecho circulante y doble lecho son los tipos más comunes de gasificación de lecho fluidizado (Figura 1 (b)). El agente gasificante es soplado hacia el lecho de partículas sólidas con suficiente velocidad con el fin de mantener en suspensión las partículas en el campo

gravitacional, así como los materiales del lecho (ej: arena). No existe una diferenciación clara entre los distintos procesos que se llevan a cabo en la gasificación como lo es el secado, la pirólisis, la oxidación parcial y la reducción (Rajvanshi, 1986).

En el gasificador de flujo arrastrado (Figura 1c) el principal combustible son los lodos donde abunda el carbón, se alimenta de manera directa y se caracteriza por el corto tiempo de residencia, la alta temperatura, la presión y las grandes capacidades. Estos no son recomendados para biomásas (Carbón, madera, entre otros) debido a las grandes cantidades que se necesita para operarlos (Rajvanshi, 1986).

### **3.1 Gasificación de lecho fijo co-corriente (Downdraft)**

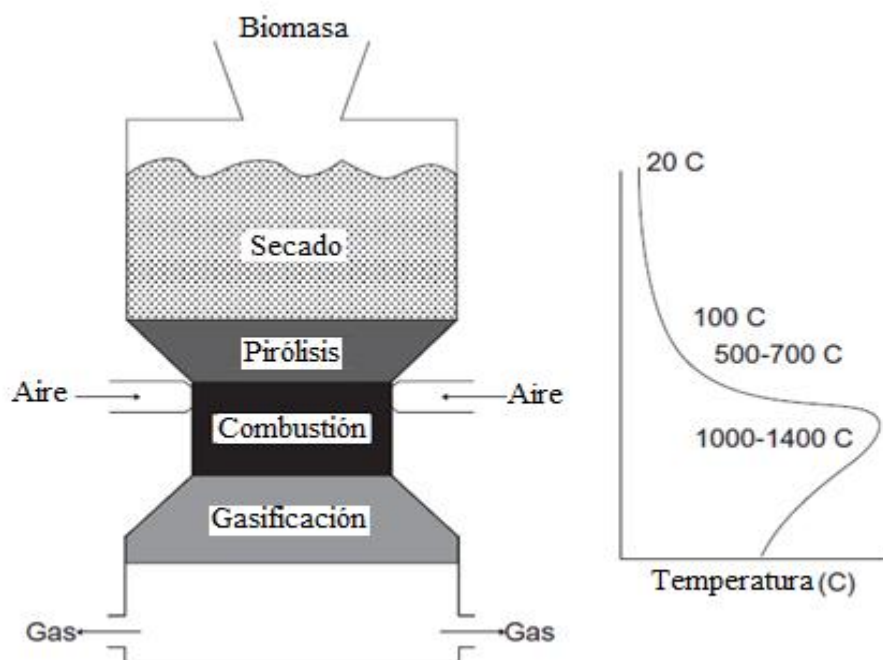
Algunos autores lo clasifican como lecho fijo debido a que el tamaño del lecho permanece constante en el reactor, esto si se cuenta con continua alimentación (Logtenberg & Dixon, 1998) (McKendry, Energy production from biomass (part 3): gasification technologies, 2002) (Guardo, Coussirat, Recasens, Larrayoz, & Escaler, 2006). Además, las zonas de secado, pirólisis, combustión y gasificación permanecen constantes. Otros sin embargo lo consideran lecho móvil (Straka & Bucko, 2009) (Sudiro, Pellizzaro, Bezzo, & Bertucco, 2010) ya que si se sigue el comportamiento de una partícula, ésta va atravesando las diferentes zonas desde que entra como combustible hasta que sale gasificada.

El proceso de gasificación en lecho fijo puede ser en contra-corriente y co-corriente, dependiendo de si el combustible fluye en el sentido del gas producido o en contra; el proceso co-corriente (Figura 2) consiste en un reactor que se llena con el combustible y trabaja hasta que se haya consumido completamente (Sharma, Experimental study on 75 kWth downdraft (biomass) gasifier system, 2009) (Sheth & Babu, 2009) (Itai, Santos, Branquinho, Malico, & Ghesti, 2014); sin embargo, existen reactores con este tipo de configuración que por medio de mecanismos especiales pueden tener una operación continua (Kramreiter, Url, Kotik, & Hofbauer, 2008) (Van de steene & Tagutchou, 2010).

Los gasificadores “*downdraft*” son ampliamente utilizados, principalmente por la facilidad del diseño y construcción además de la baja cantidad de alquitranes que hay en el gas producido (FAO Forestry Paper, 1986) (Bhavanam & Sastry, 2011), lo que lo hace apto para ingresar a un motor de combustión interna. En este tipo de gasificadores, con carbón vegetal como combustible, se

pueden obtener porcentajes de composición entre 55-65% Nitrógeno, 28-32% de Monóxido de carbono, 1-3% de Dióxido de carbono, 4-10% de Hidrógeno y 0-2% de Metano (Reed & Das, 1988) (McKendry, Energy production from biomass (part 3): gasification technologies, 2002).

Como se observa en la (Figura 2), el proceso cuenta con cuatro zonas agrupadas de acuerdo a la transformación que sufre el combustible cuando pasan por ellas; en su orden desde la parte superior hasta la inferior, se clasifican como zona de secado, de pirolisis, de combustión y de reducción. En la zona de secado, la humedad es removida por medio del calor generado en las zonas inferiores, la velocidad de secado depende principalmente del área superficial del combustible, la diferencia entre la temperatura de los gases calientes y el combustible, y la conductividad de ésta; la temperatura en esta parte varía entre los 70°C y los 200°C (Basu, 2013).



**Figura 2.** Funcionamiento de un reactor de lecho fijo co-corriente con perfil de temperatura (Basu, 2013).

En la zona de pirolisis donde comienza la degradación térmica del combustible en ausencia del agente oxidante; la temperatura puede oscilar entre los 350°C y los 500°C, se obtiene una mezcla de gases, líquidos y carbón, cuyas proporciones van a depender del método utilizado. Para determinar estas proporciones y las características de los productos se puede utilizar la



temperatura, la presión, tiempo de residencia y la velocidad de calentamiento en un modelo matemático. (Jaojarruek & Kumar, 2009).

En la zona de combustión donde se producen las reacciones exotérmicas y por ende las temperaturas más altas del proceso, es donde se genera el calor necesario para mantenerlo; la temperatura de la mezcla gas-sólidos en esta parte del reactor puede estar entre los 1000°C y los 1200°C (Di Blasi, 2009).

Ya por último, la zona de gasificación donde se llevan a cabo las reacciones heterogéneas sólido-gas provenientes de la zona de combustión, a una temperatura que puede estar entre los 900°C y los 1100°C (Bain & Broer, 2011). Los gases salen de esta etapa a temperaturas que pueden oscilar entre los 400°C y 700°C (Basu, 2013) y tiene un contenido considerable de cenizas, alquitranes y vapor de agua, razón por la cual deben tener un tratamiento adicional de acondicionamiento para ingresar al motor de combustión interna.

#### 4. ESTADO DEL ARTE

Debido a la exigencia ambiental en torno a la generación de biomasas subproductos de diversos procesos agrícolas, el uso integral de los cultivos, el uso irracional de los combustibles fósiles y a la implementación de procesos que sean amigables con el medio ambiente. Los métodos de diseño y evaluación de procesos térmicos a partir de la modelación matemática han permitido obtener procesos y sistemas con menor cantidad de emisiones nocivas y mayor rendimiento energético (McKendry, Energy production from biomass (part 1): overview of biomass, 2002).

El continuo desarrollo de la gasificación muestra que ha habido un progreso notorio en el campo de la ingeniería química y otras ramas afines mediante los modelos numéricos (Nikrityuk, Föster, & Meyer, 2014) proponen algunas características por las cuales un modelo matemático puede utilizarse como herramienta integral para la predicción y diseño de un proceso de gasificación:

- Los modelos numéricos podrían llegar a considerarse más baratos que las investigaciones experimentales.
- Mediante un modelo matemático se puede “ver” o “acceder” a partes del proceso las cuales es imposible obtener datos.
- Puede utilizarse para encontrar valores óptimos en equipos existentes o mejores en el diseño de nuevos equipos.
- El modelado no es estático, pueden modificarse algunos parámetros para ampliar el rango de aplicaciones.

Un ejemplo de las posibilidades que plantea el uso de los modelos matemáticos, es un proceso de gasificación con una máxima concentración de hidrógeno y monóxido de carbono, una temperatura de salida de los gases y un poder calorífico inferior para lo cual se requiere variación en las condiciones de entrada de la biomasa, una relación adecuada de aire/combustible y en algunos casos las geometrías y la configuración del gasificador que se va a utilizar. Mediante el uso de los modelos matemáticos puede establecerse que un contenido de humedad inferior en la biomasa alimentada se presenta aumento en el poder calorífico del gas obtenido y viceversa. También puede verificarse el perfil de temperaturas durante todo el proceso en el equipo (Basu, 2013). La modelación puede contribuir a la optimización de los parámetros de procesos mediante la inclusión de balances de masa y energía, modelos cinéticos, equilibrio termodinámico. Así pues, las

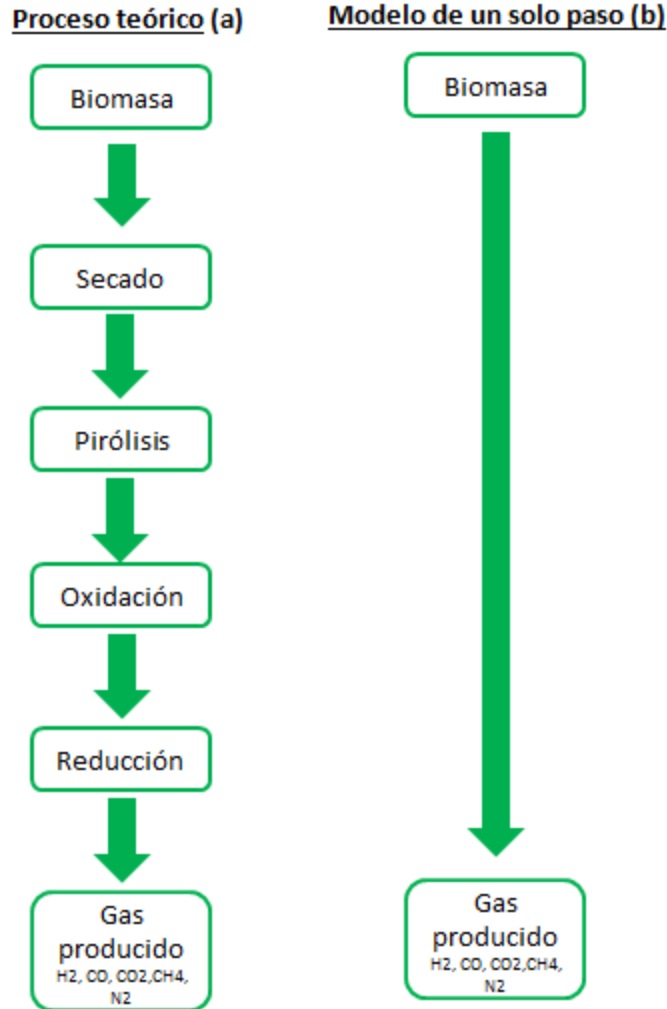
evaluaciones de este tipo no solo permite verificar los rendimientos del proceso si no también obtener un conocimiento claro de la dinámica del proceso (Nikrityuk, Föster, & Meyer, 2014).

Sin embargo, la modelación matemática de cualquier proceso termoquímico en sí misma no es suficiente si no se cuenta con datos experimentales o de campo que validen los modelos. En efecto, se ha encontrado que los cambios al proceso a partir de resultados hallados con modelos matemáticos, parten del establecimiento de un modelo base que se compara con condiciones reales antes de realizar sobre este cualquier tipo de modificaciones (Nikrityuk, Föster, & Meyer, 2014).

Considerando la aplicación de los modelos matemáticos a los procesos termoquímicos como es el caso de la gasificación, deben definirse de forma tales que permitan la descripción y la predicción del comportamiento del proceso desde el punto de vista de los procesos físicos y químicos en las zonas que los componen (secado, pirólisis, combustión y reducción). En este sentido, deben incorporarse modelos que permitan predecir el consumo y la generación de diferentes compuestos durante las etapas del proceso, las condiciones de salida del gas, la composición, todo estos suponiendo que dentro del proceso se supone una mezcla de gases y sólidos (Puig-Arnavat, Bruno, & Coronas, 2010).

Existen diferentes planteamientos matemáticos para describir los procesos de gasificación que transforman variables de entrada en unos parámetros y variables físicas deseados de salida, los modelos que describen este tipo de fenómenos se denominan cero-dimensional (0-D) y modelos dimensionales, estos se clasifican a su vez en uno, dos o tres dimensiones (1-D, 2-D y 3-D), lo que depende del número de coordenadas espaciales que se consideren. Entre las variables de entrada y salida más utilizadas se encuentran: los flujos másicos, las composiciones, temperaturas, presiones, etc. La gasificación de combustibles sólidos se simula bajo cualquiera de los planteamientos mencionados (Pérez Bayer, 2009).

Los modelos 0-D de la gasificación de biomasa se basan en el equilibrio termodinámico o en la cinética química, relacionando variables, esto es, las variables de entrada con las de salida como se observa en la Figura 3 (b), prediciendo la temperatura de equilibrio y la composición final del gas, esto en función del tipo de biomasa, la humedad, la relación aire/combustible y la temperatura, no obstante con este modelo no es posible evaluar el comportamiento de ningún parámetro a lo largo del equipo (Pérez Bayer, 2009) (Puig-Arnavat, Bruno, & Coronas, 2010).



**Figura 3.** Etapas proceso de gasificación (Ratnadhariya & Channiwala, 2009).

Los modelos dimensionales consideran la variación de todos los parámetros en el interior del gasificador en una, dos o tres coordenadas espaciales, según sea el caso. Este tipo de modelos requieren un planteamiento de acoplamiento entre las cinéticas químicas y fenómenos de transporte (masa, energía y momento), para estudiar el desarrollo de los compuestos, el estado térmico y dinámico del proceso en las coordenadas elegidas. Los modelos anteriormente descritos se utilizan principalmente para comprender el proceso de gasificación, a diferencia de los modelos 0-D que son útiles para la optimización del proceso y las plantas de gasificación, mientras que los dimensionales (1-D, 2-D y 3-D) permiten optimizar y a su vez la posibilidad de extraer parámetros relacionas con el diseño de este tipo de equipos (Pérez Bayer, 2009).

## 4.1. Tipos de modelo.

### 4.1.1. Modelo equilibrio termodinámico.

El modelo de equilibrio termodinámico es una herramienta que sirve para calcular el rendimiento máximo que puede ser alcanzado por un producto deseado en un sistema de reacción. Este modelo proporciona una predicción ajustada del rendimiento máximo que se puede alcanzar de un producto en este caso el gas. Los cálculos de los modelos son independientes del diseño de gasificador a diferencia de los modelos cinéticos mencionados anteriormente, este tipo de modelos suelen ser más adecuados para estudiar la influencia de diferentes parámetros del combustible sobre el proceso. En el equilibrio termodinámico un sistema de reacción está en su estado más estable, esta condición se consigue cuando la entropía del sistema se maximiza y la energía libre de Gibbs se minimiza. Sin embargo, el equilibrio no se puede conseguir, esto se debe principalmente a que las temperaturas de operación son relativamente bajas (temperaturas de salida del gas varían desde 750°C hasta 1000 °C) (Bridgwater, 2001).

El equilibrio químico se determina por cualquiera de las siguientes vías:

- Constantes de equilibrio
- Minimizando la energía libre de Gibbs

Existen dos métodos para el modelado de equilibrio: el método estequiométrico y el método no estequiométrico, el modelo estequiométrico requiere de unos mecanismos de reacción claramente definidos donde se incorporen las reacciones químicas y las especies involucradas en el proceso. El modelo de equilibrio no estequiométrico se basa en la minimización de la energía libre de Gibbs en el sistema sin necesidad de especificar las posibles reacciones que se llevan a cabo (Mathieu & Dubuisson, 2002).

Chern, Walawender, & Fan (1991) desarrollaron un modelo de equilibrio para evaluar el grado de aproximación en la predicción del rendimiento de un gasificador downdraft de madera sobre diferentes parámetros de funcionamiento. Los parámetros experimentales como rendimiento de carbón, temperatura de salida y composición del gas fueron simulados y los resultados fueron comparados con datos experimentales. Para llevar a cabo el desarrollo de los modelos se usaron simplificaciones y supuestos, entre ellos los más destacados son: el residuo carbonoso es considerado carbón puro, el producto (*syngas*) está compuesto por N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub>,

el gas producido y el carbón subproducto se encuentran en equilibrio termodinámico. Chern, Walawender, & Fan (1991) Consideran reacciones homogéneas y heterogéneas en equilibrio para encontrar la composición de los gases, las reacciones son las siguientes:



En esta simulación, las ecuaciones de los balances de masa y energía fueron resueltas en simultáneo con la relación de fracciones molares de los gases con constantes de equilibrio para reacción, con el fin de encontrar la composición del producto. Los datos predichos en las variaciones de los parámetros de funcionamiento del gasificador, en general, fueron buenos en comparación con los datos experimentales.

Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu (2001) Propusieron un modelo de equilibrio para un gasificador de biomasa tipo downdraft para predecir la composición del gas a la salida y el poder calorífico de este. El modelo propuesto es una versión modificada del modelo desarrollado por Chern, Walawender, & Fan (1991). Se asume que todas las reacciones están en equilibrio termodinámico, todos los productos de la pirólisis son quemados completamente en la zona de reducción del gasificador, no se considera ni el nitrógeno ni el azufre que pueda contener el combustible. El conjunto de ecuaciones compuesto por los balances de masa y energía y las constantes de equilibrio de las reacciones (2.01 y 2.04), este se resolvió utilizando el método Newton-Raphson. Los valores predichos son cercanos a los disponibles en la literatura para la madera.

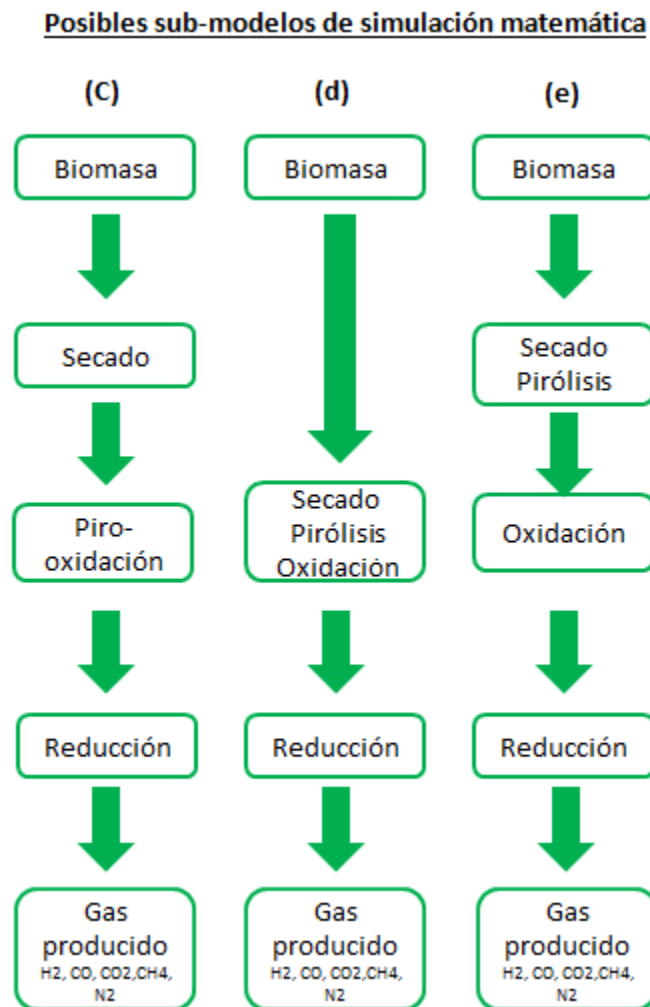
El modelo de equilibrio propuesto por Melgar, Pérez, Laget, & Horillo (2007) incorpora la fracción másica del azufre en la fórmula de la biomasa, la reacción global de gasificación se modificó para incorporar la producción de  $\text{SO}_2$  y la liberación de  $\text{O}_2$  no convertido. El modelo de ecuaciones no lineales fue resuelto empleando el método de Newton-Raphson, los datos obtenidos con este modelo fueron comparados con los datos experimentales de Jayah, Aye, Fuller, & Stewart (2003).

Jarunghammachote & Dutta (2007) modificaron el modelo de equilibrio propuesto por Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu (2001) incorporándole el nitrógeno en la fórmula química de la biomasa y multiplicando la constante de equilibrio por un coeficiente. Datos experimentales reportados por Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu (2001), Altafini, Wander, & Barreto (2003) y Jayah, Aye, Fuller, & Stewart (2003) fueron utilizados para modificar el modelo. La cantidad de metano incrementa dramáticamente y se encontró más cerca a los datos experimentales. El resultado de modificar el modelo es satisfactorio y los datos son muy parecidos a los reportados en la literatura. Con la modificación del modelo los datos obtenidos fueron satisfactorios comparados con los valores experimentales. El modelo modificado fue empleado para simular el proceso de gasificación de residuos urbanos en Tailandia, variaron el contenido de humedad en la composición del gas producido y la temperatura.

Vaezi, Passandideh-Fard, Moghiman, & Charmchi (2008) utilizaron el modelo de equilibrio termodinámico reportado por Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu (2001). El modelo se utiliza para encontrar la idoneidad de una biomasa, para una aplicación en particular. Los autores varían el contenido de oxígeno y la relación C/H para 55 biomásas diferentes con su respectivo análisis último. Se analiza la influencia de dichas variaciones en la producción de “syngas”, los resultados fueron graficados en un formato general, que puede ser utilizado para una variedad de biomásas.

Sharma (2008) desarrolló una breve descripción de modelos de equilibrio desarrollados en el pasado, él propone una reacción global de gasificación basado en el modelo heterogéneo incluyendo la formación de “char”. Cuatro balances atómicos (C, H, O y N), cuatro constantes de equilibrio, balances de energía y ecuaciones basadas en la ley de Dalton de presiones parciales constituyen el modelo que propone el autor. Este modelo predice el *char* sin reaccionar a varias condiciones termodinámicas por encima de la estimación de la composición del gas, el modelo fue validado con los datos experimentales de Jayah, Aye, Fuller, & Stewart (2003).

Ratnadhariya & Channiwala (2009) propusieron un modelo de equilibrio y una de cinética libre para tres zonas de un proceso de gasificación de biomasa. El esquema de la división del gasificador para ser modelado se puede ver en la Figura 4 (e). La primera zona del modelo es secado y pirólisis, la segunda zona es oxidación y la tercera zona corresponde a reducción. Cada zona fue formulada con: reacción estequiométrica, balances elementales de masa y balance de energía. La relación empírica se considera como el 50% del hidrógeno en las biomasa y el resto es considerado las que liberan los hidrocarburos. El modelo propuesto no utiliza ninguna relación de las constantes de equilibrio, por otra parte, muchos de los supuestos utilizados en el modelo carecen de justificación, como no hay transferencia de calor entre las zonas, no hay reacción de  $\text{CH}_4$  y  $\text{C}_2\text{H}_2$  en las zonas de oxidación y reducción.



**Figura 4.** Posibles sub-modelos de simulación de gasificadores (Ratnadhariya & Channiwala, 2009).



Barman, Ghosh, & De (2012) Incluyen los alquitranes en la reacción global de gasificación, la composición de éstos utilizada en el modelo fue tomada de la literatura. El modelo está constituido por tres balances atómicos (C, H y O), tres relaciones de equilibrio y el balance de energía correspondiente al proceso. Ellos reportan la modificación del modelo con un coeficiente de 3,5 para las constantes de equilibrio, mejorando lo predicho de la composición de gas producida experimentalmente, los datos obtenidos se validaron con datos reportados por varios autores en la literatura.

Silva & Rouboa (2013) Presentan un modelo realista de gasificación basado en el punto límite del carbón, concepto desarrollado por Ptasiński, Prins, & Pierik (2007), discuten el efecto de enriquecer el oxígeno en el aire. Los modelos de equilibrio son considerados homogéneos y heterogéneos, estos están conformados por balances de masa, balance de energía. El modelo propuesto determina la temperatura en el punto límite del carbón i.e. punto óptimo de gasificación. Como conclusión pudieron determinar que al enriquecer el oxígeno del aire se incrementa la eficiencia energética y exergética.

#### **4.1.2. Modelo cinético**

La insuficiencia de los modelos de equilibrio termodinámico para relacionar los parámetros de diseño del gasificador con la composición final del gas producido, conduce al desarrollo de modelos cinéticos para evaluar y simular el comportamiento del gasificador. Los modelos cinéticos permiten comprender parámetros de diseño y operación como velocidad de reacción, tiempo de residencia e hidrodinámica del reactor (Velocidad superficial, velocidad de difusión y la longitud del gasificador). Este modelo ofrece un campo amplio para investigar el comportamiento de un gasificador a través de la simulación y aunque con más precisos en los resultados pero computacionalmente más complejos (Puig-Arnavat, Bruno, & Coronas, 2010).

Una gran parte de los modelos representan el modelado para la reacción de reducción, y a menudo separar en sub-modelos la pirolisis, oxidación y reducción. Separar el proceso general, que se muestra en la Figura 3(a), en sub-modelos ayuda en la simplificación del modelo general y además proporcionan una mejor comprensión del comportamiento del gasificador downdraft, la división de los sub-modelos se puede realizar de diferentes formas las más utilizadas se puede observar en la Figura 4 (Patra & Seth, 2015).

Blasi (2000) propone un modelo en estado no estacionario unidimensional para la gasificación de biomasa en un modelo de gasificación estratificado. El modelo propone un conjunto de ecuaciones generalizadas para todas las zonas del gasificador, este incluye balances de masa y energía de ambas fases sólida y gaseosa, incluye las reacciones de varios procesos como el de secado, pirólisis, combustión y gasificación de “char”. La evaporación de la humedad fue considerada como un proceso de difusión limitada y es representado por una expresión empírica de presiones de vapor. La zona de pirólisis fue representada con una reacción global de una etapa, donde se producen las fracciones de gases, alquitranes y carbones. Para la simulación del proceso de gasificación, la composición de los gases producidos en la zona de pirólisis es requerida, Las reacciones de combustión y reducción del carbón son heterogéneas y fueron descritas por el modelo del núcleo sin reaccionar. En este estudio, los carbones producidos fueron asumidos como carbón puro y los productos de la combustión solo se asumió el dióxido de carbono.

Giltrap, McKibbin, & Barnes (2003) propone un modelo cinético en estado estacionario para predecir la composición del gas producido y la temperatura en el interior del gasificador usando los parámetros de las reacciones cinéticas propuestas por Wang & Kinoshita (1993), el modelo fue desarrollado especialmente para la zona de reducción y se asume que todos los productos de la pirólisis fueron completamente craqueados, por lo tanto las reacciones en esta zona no fueron contempladas en el modelo. Las velocidades de reacción fueron consideradas para tener una dependencia de la temperatura de tipo Arrhenius y es proporcional a la diferencia entre la relación real reactante/producto y la relación de equilibrio correspondiente. El sistema de nueve ecuaciones diferenciales fue resuelto usando la función ODE45 de MATLAB.

Jayah, Aye, Fuller, & Stewart (2003) desarrollaron un modelo cinético que consiste en dos sub-modelos, llamados, “*flaming pyrolysis*” y gasificación. El sub-modelo de la zona de “*flaming pyrolysis*” es usado para determinar la temperatura máxima y la composición de los gases que dejan esta zona. El concepto de equilibrio en las reacciones químicas con balances de masa y energía son usados en el desarrollo del modelo. El sub-modelo de la zona de gasificación es representado como un modelo unidimensional de una sola partícula a lo largo del eje axial, este sub-modelo incluye la descripción física y química del proceso, ecuaciones de flujo, fenómenos de transporte y principios de conservación. El modelo fue calibrado utilizando valores obtenidos en ensayos experimentales.

Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo (2008) desarrollan un modelo en estado estacionario unidimensional para el proceso de gasificación en un gasificador de lecho fijo de tipo *downdraft*. El modelo tiene en cuenta casi todos los fenómenos que ocurren durante el proceso de gasificación como lo son la evaporación de la humedad y la de volatilización de la biomasa, reacciones heterogéneas del carbón con vapor de agua, dióxido de carbono, hidrógeno y oxígeno, combustión del material volátil, reacciones homogéneas y reacciones de reformado de metano y alquitranes. La fase gaseosa incluye  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $CH_4$ ,  $C_6H_{6,2}O_{0,2}$ ,  $O_2$  y  $N_2$  y la fase sólida incluye la biomasa vegetal, el carbón y las cenizas. En el modelo se aplica el planteamiento del balance de Shell para llevar a cabo las diferentes ecuaciones de conservación de especies, energía, y pérdida de presión a través de la longitud del reactor, las ecuaciones de conservación de energía en cada fase consideran la transferencia de calor por conducción entre las fases y la pared del gasificador, por conducción en dirección axial y radial. La caída de presión a lo largo del lecho es descrita por las ecuaciones propuestas por Ergun. El modelo fue validado con diferentes biomásas de diferentes tamaños y variando la velocidad superficial del aire. Ellos encontraron concordancia razonable entre los resultados experimentales y los calculados.

Sharma (2011) desarrolló un modelo cinético unidimensional en estado estacionario para predecir el rendimiento de un gasificador de biomasa tipo *Downdraft*, el lecho empacado de la biomasa en el gasificador fue asumida como porosa por naturaleza. El proceso termoquímico fue separado en cinco zonas (precalentamiento, secado, pirólisis, combustión y reducción). El modelo para las reacciones de la zona de reducción fue descrito como en otros artículos del mismo autor, el modelo predice el carbón sin reaccionar y la composición final del gas. El enfoque del modelado cinético de la zona de reducción constituye un algoritmo que permite una rápida convergencia con una fidelidad adecuada. Este modelo fue resuelto utilizando el algoritmo para matrices tridiagonales o algoritmo de Thomas. El modelo del gasificador fue validado con valores experimentales obteniendo muy buenos resultados.

Gordillo & Belghit (2011) desarrollaron un modelo numérico de un gasificador solar de carbón biomasa (Biochar) con vapor de un sistema cinético. Las reacciones de pirólisis y craqueo no fueron tenidas en cuenta en este trabajo, el modelo usa reacciones cinéticas propuestas por Wang & Kinoshita (1993).

Simone, Nicolella, & Tognotti (2013) propusieron un modelo matemático, basado en la literatura encontrada de los modelos cinéticos, submodelos de transferencia de masa y calor. El gasificador se representa con un modelo 1-D (unidimensional) y es válido para la zona de reducción. El modelo toma las fases sólidas y gaseosas por separado, de forma similar a los mostrados por Tinaut, Melgar, Pérez, & Horrillo (2008) y Blasi (2000). El gasificador es dividido en pequeñas partes de espesor  $dz$ . Cada división incorpora todos los fenómenos químicos y físicos con los mismos términos. En este trabajo la desvolatilización de la biomasa es representada con una reacción global generando gas, alquitranes y carbones de acuerdo con los coeficientes asignados para la distribución de macro-productos de Blasi (2000), el carbón generado se asume como completamente puro. El sistema de ecuaciones fue resuelto utilizando el software gPROMS, el sistema de ecuaciones diferenciales fue resuelto utilizando el método de diferencias finitas regresivas de primer orden. La diferencia entre los resultados del modelo y los experimentales fue minimizada por ajuste de parámetros.

Blasi & Branca (2013) propone un modelo matemático para la gasificación de pellets de madera en un gasificador de núcleo abierto de tipo *downdraft*, con doble entrada de aire. Los autores llevaron a cabo un análisis de la influencia de la cantidad y la posición de la entrada secundaria de aire sobre el perfil de temperaturas y la conversión de alquitranes y carbones para un reactor a escala piloto desarrollado por Barrio, Fossum, & Hustad (2001), los datos reportados por estos autores fueron comparados con datos experimentales. Las ecuaciones de conversión para la fase sólida y gaseosa fueron escritas de manera unidimensional, no estacionario y en lecho empacado. La solución del modelo de ecuaciones es llevada a cabo usando el procedimiento de división del operador y las aproximaciones de diferencias finitas. El modelo fue validado con los datos experimentales reportados por Barrio, Fossum, & Hustad (2001), la predicción de la temperatura fue buena, en general las mediciones realizadas y comparadas con los datos experimentales fueron aceptables, excepto para las predicciones de los rendimientos de metano.

## **5. REFERENCIAS EXPERIMENTALES DE LITERATURA TÉCNICA**

Disponer de datos y resultados experimentales es uno de los aspectos más importantes en el desarrollo de modelos matemáticos. Estos datos son requeridos para la validación del modelo. Sin una validación del modelo, no se pueden hacer predicciones y sería un modelo no válido. Para este trabajo se colectaron los datos experimentales de la literatura de los reportes de (Barrio M. , 2002) (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003) que se tomarán como referencia.

La elección de datos experimentales se basa principalmente en la recolección de información sobre parámetros de operación como el tipo de biomasa, el contenido de humedad, la relación aire combustible, relación de equivalencia, la temperatura final de los gases, composición del gas obtenido y el poder calorífico de este.

### **5.2. Propiedades de la biomasa**

Es muy importante para el desarrollo del modelo conocer las propiedades de la biomasa a gasificar ya que está proporciona información relevante sobre el mecanismo del proceso y permite calcular mediante fórmulas algunas propiedades físicas y termodinámicas desconocidas del combustible a utilizar. La biomasa está compuesta por carbón, hidrógeno, oxígeno, algunas trazas nitrógeno, azufre y compuestos inorgánicos conocidos como cenizas, la composición de cada uno de estos se obtiene mediante un análisis elemental que se le hace a la biomasa. También se hace un análisis próximo con este ensayo se obtiene la humedad, composición de material volátil y no volátil, carbón fijo que contiene. Para el desarrollo de este modelo se requiere el análisis próximo y el más importante el análisis último, la composición de C, H, N, S y cenizas se determinan experimentalmente por análisis químico, mientras la cantidad de oxígeno se determina por diferencia. Los datos reportados por (Barrio M. , 2002) y (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003) se resumieron en la Tabla 2.

**Tabla 2.** Propiedades de la biomasa de referencia.

Parámetros	Jayah et al, 2003	Barrio M, 2002
Biomasa	Madera de caucho	"Wood chips"
Análisis último *		
C	50,60%	50,70%
H	6,50%	6,90%
N	0,20%	<0,3%
O	42%	42,40%
Cenizas (ASH)	0,70%	0,39%
Humedad (MC) (%bs)	12,5 - 18,5%	6,38 - 8%
Poder calorífico (MJ/kg)	19,6	18,86

\*b.s: Base seca

### 5.1.1. Relación aire-combustible

La relación aire combustible (A/F) es la cantidad de aire alimentada por unidad de masa de combustible. En el proceso de gasificación, el radio de equivalencia real es siempre menos que el estequiométrico ya que la gasificación es un proceso de oxidación parcial de la biomasa alimentada. La relación entre el (A/F) real sobre el (A/F) estequiométrico se conoce como relación de equivalencia, y se simboliza según algunos autores con la letra griega  $\lambda$ , otros autores con la letra  $\phi$  y otros simplemente usan las siglas en ingles ER (Equivalence ratio).

$$\text{Relación de equivalencia } \phi = ER = \frac{(A/F)_{real}}{(A/F)_{estequimetrico}}$$

Los datos recogidos de la literatura seleccionada sobre las relaciones de equivalencia se resumen en la Tabla 3.

**Tabla 3.** Radio de equivalencia y relación aire combustible de las referencias

Parámetros	Jayah et al, 2003	Barrio M, 2002
(A/F) <sub>real</sub> (kg aire/kg biomasa)	1,86-2,37	1,45-1,70
(A/F) <sub>estequimetrico</sub> (kg aire/kg biomasa)	6,22	5,877
Relación de equivalencia $\phi$ (ER)	0,29-0,38	0,24-0,29

### 5.1.2. Composición del gas producido

El gas producido se compone principalmente de H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O y N<sub>2</sub>, estas se expresan tanto en base seca como en base húmeda. Los datos reportados por (Barrio M. , 2002) se adaptan y se presentan en la Tabla 4 y los reportados por (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003) en la Tabla 5.

**Tabla 4.** Composición del gas de ensayos experimentales de (Barrio M. , 2002).

Corrida	MC (%)	Air/fuel	$\phi$	H <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]	CO [% <sub>bs</sub> ]	CO <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]	CH <sub>4</sub> [% <sub>bs</sub> ]	N <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]
#8a	7,69	1,384	0,215	16,1	24,7	9,7	1,6	47,9
#8b	7,25	1,536	0,239	16,8	25,8	9,1	1,5	46,8
#9	6,89	1,707	0,266	16,5	25,3	9,3	1,4	47,3
#12	7,01	1,684	0,262	16,4	25,2	9,4	1,5	47,5
#13a	6,38	1,659	0,258	15,6	23,9	10,1	1,7	48,7
#13b	8,00	1,520	0,236	17,2	16,4	8,8	1,4	46,3
#13c	7,57	1,454	0,226	16,4	25,2	9,4	1,6	47,5
#14	6,66	1,633	0,254	16,4	25,3	9,4	1,5	47,4

**Fuente:** (Barrio M. , 2002)

**Tabla 5.** Composición de gas de ensayos experimentales de (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003).

Corrida	MC [%]	A/F real	$\phi$	H <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]	CO [% <sub>bs</sub> ]	CO <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]	CH <sub>4</sub> [% <sub>bs</sub> ]	N <sub>2</sub> [% <sub>bs</sub> ]
T1	18,5	2,03	0,326	17,2	19,6	9,9	1,4	51,9
T2	16,0	2,20	0,353	18,3	20,2	9,7	1,1	50,7
T3	14,7	2,37	0,383	17,2	19,4	9,7	1,1	52,6
T4	16,0	1,96	0,315	17,0	18,4	10,6	1,3	52,7
T5	15,2	2,12	0,34	13,2	19,7	10,8	1,3	55,0
T6	14,0	2,29	0,364	12,5	18,9	8,5	1,2	59,1
T7	14,7	1,86	0,299	15,5	19,1	11,4	1,1	52,9
T8	13,8	2,04	0,327	12,7	22,1	10,5	1,3	53,4
T9	12,5	2,36	0,375	13,0	19,1	10,7	1,2	56,0

**Fuente:** (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003)

Esta información se emplea en la validación de los resultados que arroja el modelo desarrollado , bajo los mismos parámetros reportados

## 6. METODOLOGÍA DE DESARROLLO DEL MODELO

El desarrollo de un modelo matemático requiere un enfoque sistemático con el esquema de postulación de teorías basadas en trabajos experimentales y suposiciones. El objetivo principal de cualquier modelación matemática es crear un sistema que sea capaz de realizar una acción similar a la del sistema natural. La simulación es el resultado de teorías e hipótesis. Por lo tanto, es muy importante seleccionar teorías y supuestos adecuados al proceso a simular. Para el modelo a desarrollar, se tuvieron en cuenta los siguientes supuestos:

- El objetivo de la simulación es imitar el comportamiento de un gasificador de lecho fijo de corriente descendente.
- Se utilizó como combustible biomasa.
- Se tomó como agente gasificante aire atmosférico (21% O<sub>2</sub>, 79% N<sub>2</sub>).
- El gasificador se tomó de un solo paso en estado estacionario.
- El modelo desarrollado en EES® se consideró adiabático y que opera a 1 atm de presión.
- La composición del gas producido se supone que es una mezcla de H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>S y N<sub>2</sub>. A pesar de la evidencia de la formación de alquitrán y otros hidrocarburos no se tienen en cuenta.
- El N<sub>2</sub> no participa reaccionando en el proceso de gasificación, la composición en el gas producido es igual a la composición de entrada de éste.
- Existe equilibrio químico de todas las especies en todo el gasificador.
- El gasificador se considera adimensional (0-D)
- Los gases en el gasificador se comportan como un gas ideal.
- Se considera proceso de gasificación de tipo cuasi-equilibrio y con equilibrio local, lo cual permite emplear los valores de las propiedades termodinámicas reportadas en las bases de datos y tablas termodinámicas.

Después de nombrar los supuestos que se tuvieron en cuenta para el desarrollo del modelo, se desagrega el esquema del modelo. En este trabajo, varias propiedades de la gasificación como parámetros de la biomasa y los sólidos generados, la relación de equivalencia ( $\phi$ ) y otras han sido identificadas y calculadas conforme lo requiere el modelo. Éste consiste en un modelo que tiene



como referencia la generación de *syngas*, fue modelado usando el equilibrio termodinámico estequiométrico con reacciones características del proceso de gasificación.

Con los supuestos y la metodología de desarrollo establecida, se necesita una herramienta o software adecuado para solución, manipulación y recolección de datos. Los más utilizados y reportados en la literatura son Excel (VBA), FORTRAN, MATLAB, EES y programas comerciales similares, para nuestro caso se seleccionó EES, debido a su fácil acceso, la capacidad de resolver sistemas de ecuaciones complejos, facilidad para interactuar con su interfaz y disponibilidad.

### **6.1. Propiedades relacionadas con la gasificación**

Las propiedades de la biomasa y del aire alimentadas al proceso junto con varias propiedades características operacionales de la gasificación se identifican en esta sección. Los parámetros o valores pueden no encontrarse en un formato requerido por el modelo, por lo que es muy importante y crucial para manipular los datos requeridos.

### **6.2. Propiedades relacionadas con la biomasa**

La biomasa es una mezcla compleja de compuestos orgánicos que componen en principalmente de carbón, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre. Los correspondientes parámetros elementales se archivan en forma de análisis último. A partir de este análisis, se puede determinar la mayoría de las propiedades de la biomasa como la formula química y el poder calorífico de ésta.

### **6.3. Formula química de la biomasa**

Debido a la alta complejidad para determinar la formula química de la biomasa se han desarrollado diversos métodos para determinar la formula aproximada equivalente. Uno de los métodos más utilizados se basa en la utilización de las composiciones elementales de la biomasa en base seca. En las ecuaciones (6.01 a la 6.05) se muestra las expresiones.

Formula general de la biomasa:  $\text{CH}_x\text{O}_y\text{N}_z\text{S}_u$

Se toma como base un átomo de carbón:

$$C = 1 \quad (6.01)$$

$$x = \frac{H\% * PM_C}{C\% * PM_H} \quad (6.02)$$

$$y = \frac{O\% * PM_C}{C\% * PM_O} \quad (6.03)$$

$$z = \frac{N\% * PM_C}{C\% * PM_N} \quad (6.04)$$

$$u = \frac{S\% * PM_C}{C\% * PM_S} \quad (6.05)$$

C%, H%, O%, N% y S% corresponden a la composición elemental de cada elemento en la biomasa reportados en el análisis último, en la Tabla 6 se reportan los valores de la formula química de la biomasa utilizada por los autores de referencia.

**Tabla 6.** Formula química de las biomásas usadas como referencia

	Análisis último [%]						CcHxOyNzSu				
Biomasa	C	H	N	O	Ash	S	c	x	y	z	u
Pellets de madera (Barrio M. , 2002)	50,7	6,9	0,3	41,7	0,39	0	1	1,62	0,62	0,005	0
Madera de caucho (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003)	50,6	6,5	0	42,2	0,7	0	1	1,53	0,63	0	0

#### 6.4. Contenido de humedad

El contenido de humedad de la biomasa normalmente se presenta en fracción másica. Sin embargo, la cantidad de agua por kilo mol de biomasa es requerida para cálculos estequiométricos. Cuando el contenido de humedad (MC) de la biomasa es conocido, la cantidad de agua (w) que ingresa al sistema puede ser determinada de la siguiente manera.

$$MC = \frac{m_{H_2O}}{m_{bms}} * 100 = \frac{m_{H_2O}}{m_{bms,seca} + m_{H_2O}} * 100 = \frac{w * PM_{H_2O}}{m_{bms} * PM_{bms} + w * PM_{H_2O}} * 100$$

Finalmente,

$$w = \frac{PM_{bms} * MC}{PM_{H_2O} * (1 - MC)} \quad (6.06)$$

El peso molecular de la biomasa se calcula de la siguiente forma:

$$PM_{bms} = C * PM_C + x * PM_H + y * PM_O + z * PM_N + u * PM_S \quad (6.07)$$

Donde  $PM_C$ ,  $PM_H$ ,  $PM_O$ ,  $PM_S$  y  $PM_N$  es el peso molecular de cada uno de los elementos que componen la biomasa

Los pellets de madera tienen un contenido de humedad del 18.5% en peso, la cantidad de agua ( $w$ ) estimado para está biomasa es 0,2973, y para la madera de caucho  $w$  es 0.297.

## 6.5. Poder calorífico

El poder calorífico en la biomasa es la cantidad que libera de calor durante combustión completa, existen varios métodos aproximados para calcular el poder calorífico como son los métodos experimentales y las correlaciones unificadas basadas en el análisis último de la biomasa. Esta característica depende del contenido de humedad de la biomasa, debido que el contenido de humedad es una característica muy importante para el proceso de gasificación no es relevante para calcular el poder calorífico experimental de la biomasa. Por lo tanto, el valor de poder calorífico para la biomasa puede calcularse utilizando las correlaciones desarrolladas por (Channiwala & Parikh, 2002) que se muestran en la ecuaciones (6.08)

$$HHV [kJ/kmol] = 0,3491C\% + 1,1783H\% + 0,1005S\% - 0,1034O\% - 0,0151N\% - 0,0211ASH\% \quad (6.08)$$

De esta manera el valor de poder calorífico corresponde al poder calorífico superior (HHV) que puede ser suministrada por la combustión, el autor de está correlación afirmó la exactitud de su correlación para predecir el poder calorífico para combustible sólidos.

Con el HHV calculado se puede obtener el poder calorífico inferior (LHV), con la ecuación (4.09) que se muestra a continuación.

$$LHV = HHV - 9 * H\% - \Delta H_{vap,H2O} \quad (6.09)$$

## 6.6. Relación de equivalencia

La relación de equivalencia hace referencia a la razón entre la relación aire combustible real  $(A/F)_{real}$  y la relación aire-combustible estequiométrica,  $(A/F)_{estequiométrica}$ , como se ya se mencionó anteriormente.

La relación aire combustible alimentada es un parámetro operacional para el modelo, puede ser manipulada con fines experimentales, mientras la relación aire combustible estequiométrica es una constante para la biomasa y se calcula con la ecuación (6.10)

$$(A/F)_{Estequimetrico} = \left(1 + \frac{x}{4} + \frac{z}{2} - \frac{y}{2}\right) * (1 + 3,76) \quad (6.10)$$

Donde  $\left(1 + \frac{x}{4} + \frac{z}{2} - \frac{y}{2}\right)$  es la cantidad de oxígeno requerido para combustión completa, en base molar es el oxígeno requerido por 1 mol de biomasa.

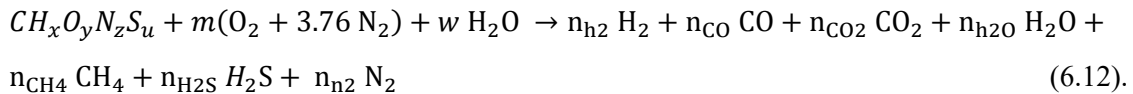
Cuando la relación de equivalencia es conocida, es posible estimar la cantidad de aire alimentada en base molar como precursora para la ecuación estequiométrica para calcular la cantidad de aire que se muestra a continuación.

$$m = \left(1 + \frac{x}{4} + \frac{z}{2} - \frac{y}{2}\right) * \varphi \quad (6.11)$$

Así, con una relación de equivalencia de 0,326, la cantidad de oxígeno alimentada es de 0,3594 kmol de O<sub>2</sub> para los pellets de madera y 0.3497 kmol de O<sub>2</sub> para la madera de caucho

## 6.7. Formulación del modelo matemático de gasificación

En este modelo se aborda a través de la consideración de equilibrio termodinámico estequiométrico, la formulación del proceso de gasificación se basa en suposiciones empíricas que fueron apoyados por resultados experimentales de gasificación de biomasa. De acuerdo con la bibliografía, la reacción química que rige el proceso de gasificación se define como:



Aplicando el principio de conservación de masa, se llevaron a cabo los balances de masa para la ecuación (6.12) para cada uno de los componentes de la biomasa C, H, N, O y S.

$$\text{Balance de Carbono} \quad 1 = n_{CO} + n_{CO2} + n_{CH4}$$

$$\text{Balance de Hidrogeno} \quad x + 2w = 2n_{h2} + 2n_{h2O} + 4n_{CH4} + 2n_{H2S}$$

$$\text{Balance de Oxígeno} \quad y + 2m + w = n_{CO} + 2n_{CO2} + n_{h2O}$$

$$\text{Balance de Nitrógeno} \quad z + 3,76 \, 2 \, m = 2n_{n_2}$$

$$\text{Balance de azufre} \quad u = n_{h_2s}$$

Para el oxígeno, los reactivos aparecen tanto en la biomasa como en el aire y a la salida en CO, CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O, como el proceso de gasificación se lleva a cabo con deficiencia de oxígeno se considera que a la salida del gas pobre no hay existencia alguna de oxígeno (O<sub>2</sub>).

El equilibrio químico se explica generalmente ya sea con la minimización de la energía libre de Gibbs o mediante el uso de constantes de equilibrio. Para llevar a cabo la minimización se requieren teorías matemáticas complejas. Por esta razón, el presente modelo se desarrolló sobre las constantes de equilibrio, dos ecuaciones adicionales se obtuvieron de las constantes de equilibrio de las reacciones que se producen en la zona de gasificación como se muestra a continuación:



Algunos autores como (Zainal, Ali, Lean, & Seetharamu, 2001) y (Higman & Van der Burgt, 2003), presentan las ecuaciones (6.13) y (6.14) combinadas en una reacción conocida como *water-gas shift reaction*, ésta se muestra en (6.16).



En el presente modelo, el equilibrio termodinámico se supuso para todas las reacciones químicas en la zona de reducción. Todos los gases se asumieron como ideales y todas las presiones se llevan a cabo a 1 atm. Por lo tanto, las constantes de equilibrio que son funciones de la temperatura para la *water-gas shift reaction* y la reacción de metanación son:

La constante de equilibrio para la *water-gas shift reaction*

$$K_1 = \prod_i (x_i)^{v_i} \left( \frac{P}{P_0} \right)^{\sum_i v_i} = \frac{(n_{CO_2})(n_{H_2})}{(n_{CO})(n_{H_2O})} \quad (6.17)$$

La constante de equilibrio para la reacción de metanación

$$K_2 = \prod_i (x_i)^{v_i} \left( \frac{P}{P^0} \right)^{\sum_i v_i} = \frac{(n_{CH_4}) (n_{Total})}{(n_{H_2})^2} \quad (6.18)$$

Donde  $x_i$  es la fracción molar de las especies  $i$  en la mezcla de gas producido,  $v$  es el número estequiométrico,  $P^0$  es la presión estándar, 1 atm, y  $n_{total}$  es el total de moles producidas. Las ecuaciones (6.17) y (6.18) expresadas en forma de igualdad se muestran a continuación:

$$0 = K_1 (n_{CO}) (n_{H_2O}) - (n_{CO_2}) (n_{H_2}) \quad (6.19)$$

$$0 = K_2 (n_{H_2})^2 - (n_{CH_4}) (n_{Total}) \quad (6.20)$$

El valor de las constantes de equilibrio  $K_1$  y  $K_2$  fueron definidos considerando la función de Gibbs como:

$$\ln K = - \frac{\Delta G_T^0}{RT} \quad (6.21)$$

$$\Delta G_T^0 = \sum_i v_i \Delta \bar{g}_{f,T,i}^0 \quad (6.22)$$

La energía libre de Gibbs para una especie en particular se establece como

$$g_j^0 = h_j(T) - T s_j(T) \quad (6.23)$$

Donde  $h$  es la entalpía y  $s$  es la entropía.

Para el sistema considerado, la ecuación (6.22) se puede suponer que es igual a la siguiente.

$$\Delta G_T^0 = \sum_{i=1} v_i \{ [h_{f,i}^0 + (h_i(T) - h_i(298K))] - T [S_{f,i}^0 + (S_i(T) - S_i(298K))] \} \quad (6.24)$$

Donde  $h_f^0$  es la entalpía estándar de formación,  $S_f^0$  es la entropía estándar de formación, el  $C_p$  es el calor específico a presión constante para cada uno de los compuestos, todos estos valores termodinámicos fueron calculados con las bases de datos del programa EES.

Las constantes de equilibrio y las propiedades termodinámicas necesarias para resolver el modelo del gasificador son dependientes de la temperatura. Para el cálculo de la temperatura es necesario el planteamiento de un balance de energía del proceso, éste se observa a continuación.

$$HR = h_{f,bms}^o m_{bms} + m h_{f,O_2}^o + 3,76 m h_{f,N_2}^o + w h_{f,H_2O}^o$$

$$\begin{aligned} HP = & n_{CO}(h_{f,CO}^o + Cp \Delta T) + n_{CO_2}(h_{f,CO_2}^o + Cp \Delta T) + n_{H_2}(h_{f,H_2}^o + Cp \Delta T) \\ & + n_{H_2O}(h_{f,H_2O}^o + Cp \Delta T) + n_{CH_4}(h_{f,CH_4}^o + Cp \Delta T) + n_{N_2}(h_{f,N_2}^o + Cp \Delta T) \\ & + n_{H_2S}(h_{f,H_2S}^o + Cp \Delta T) \end{aligned}$$

Y  $HR = HP$ , todas las entalpías de los gases productos y reactivos fueron tomadas como ya se mencionó anteriormente del programa EES, La entalpía de la biomasa fue calculada según (Li X. , Grace, Watkinson, Lim, & Ergüdenler, 2001):

$$h_{f,bms,298}^o = HHV - (327,63C\% + 1417,94H\% + 92,57S\% + 158,67MC) \quad (6.25)$$

Ya con los balances de masa, energía y las constantes de equilibrio se puede predecir las composiciones y la temperatura de salida, utilizando el programa EES.

## 6.8. Poder calorífico del gas producido.

El poder calorífico del gas depende de la composición de éste, para su cálculo se lleva a combustión completa lo gases obtenidos en el proceso de gasificación, una vez se tiene esto se realiza otro balance de masa y energía similar al que se realiza en el capítulo anterior, para la predicción de la composición de los productos de combustión como son  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ . Ya con estas concentraciones conocidas se plantean balances de energía.

La ecuación para calcular el poder calorífico inferior y superior del gas se muestra a continuación.

$$LHV_{syngas} = \frac{(HR_c - HP_c)}{v_{tot}} \quad (6.26)$$

Donde,

$$v_{tot} = \frac{(n_{tot} R T_n)}{P_o} \quad (6.27)$$

Donde  $v_{tot}$  es el flujo volumétrico normal de gas producido,  $n_{tot}$  moles de “syngas” producido por kmol de biomasa equivalente, R es la constante universal de los gases (8.314510 J/mol-K),  $P_o$  y  $T_n$  son las condiciones normales de un gas y según IUPAC es  $T=0^\circ C$  y  $P=1$  atm.

El poder calorífico del gas se calcula según la ecuación (5.04).

$$HHV_{syngas} = LHV_{syngas} + (n_{h2o,comb} * \Delta h_{vap} / v_{tot})$$

Con el valor de poder calorífico calculado, puede determinar la eficiencia de gas frío según (Basu, 2013), la relación se muestra a continuación:

$$n_{cg} = \frac{LHV_{syngas} v_{tot}}{LHV_{bms} f_{bms} PM_{bms}} * 100$$

### 6.9. Solución del modelo en el software EES.

EES es un programa general de resolución de ecuaciones que puede resolver numéricamente miles de ecuaciones algebraicas y diferenciales no lineales acopladas.

El programa también puede utilizarse para resolver

- ecuaciones diferenciales e integrales,
- hacer optimización,
- proporcionar análisis de incertidumbre,
- realizar regresiones lineales y no lineales,
- convertir unidades,
- verificar la coherencia de la unidad y
- generar parcelas de calidad de publicación.

Una característica importante del software EES es la base de datos termodinámica de alta exactitud y propiedades de transporte que se proporciona para cientos de sustancias de una manera que permite que se utilice con la capacidad de resolución de ecuaciones (Engineering Equation Solver, 2016). Se contó una licencia de la escuela de ingeniería de la Universidad EAFIT.

El código con el cual se desarrolló el modelo matemático se encuentra en el ANEXO A.



## 7. VALIDACIÓN

La robustez, desarrollo y utilidad del modelo matemático puede ser evaluado comparando los resultados arrojados por el modelo con datos experimentales obtenidos bajo parámetros similares. En este modelo, los parámetros que gobiernan el proceso son el contenido de humedad (MC) y la relación aire combustible o relación de equivalencia (ER ó  $\phi$ ). Por ende, el rendimiento del modelo se basa en la predicción de la composición del gas de síntesis, el poder calorífico y la temperatura de gasificación y se confrontaron los resultados con los reportados en la literatura de referencia descrita en el capítulo 4.

### 7.1. Comparación composiciones del gas

La composición del gas producido es determinada principalmente por la composición química de la biomasa, contenido de humedad y la relación de equivalencia. Así, con parámetros de procesos y composiciones químicas de biomasa similares, un modelo matemático puede predecir composiciones y temperatura de proceso similares a los datos experimentales.

Los resultados del modelo muestran que la composición del gas producido es  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$  y  $H_2O$ . La composición molar o volumétrica del gas  $x_i$  se determinó para facilitar los cálculos y la comparación con datos experimentales empleados de la literatura técnica como una mezcla de gases seca, sin embargo, la composición de  $N_2$  no se puede descartar ya que está desempeña un papel importante en la dilución del gas producido. La composición de gas seco se calcula con la ayuda de la ecuación (5.01) como se muestra a continuación.

$$x_{i,bs} = \frac{x_i}{(100-MC\%)} * 100 \quad (7.01)$$

La variación del siguiente modelo se prueba con varios parámetros de un proceso experimental, los resultados se presentan en la Tabla 7. Los datos arrojados por el modelo tienen un error promedio <10%, este error se calculó utilizando la ecuación (5.02).

$$Error (\%) = \frac{|n_{i,modelo} - n_{i,exp}|}{n_{i,exp}} \quad (7.02)$$

$$Presición (\%) = 100\% - Error (\%) \quad (7.03)$$

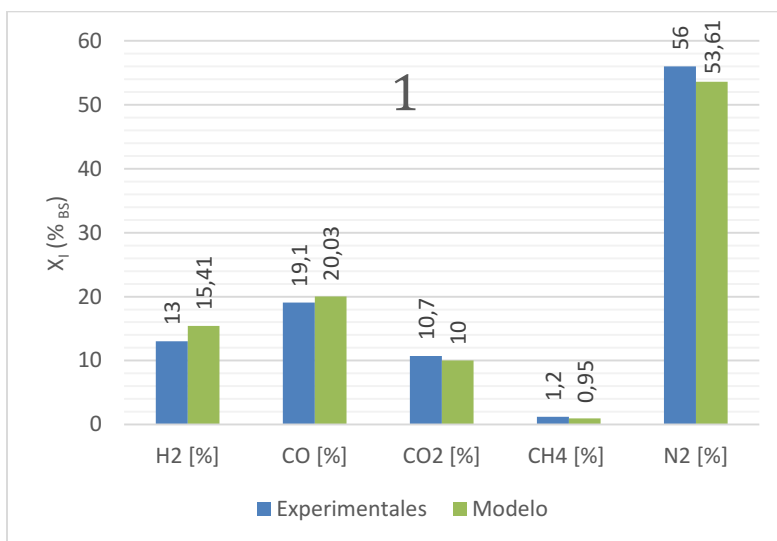
**Tabla 7.** Comparación composición en base seca de gas (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003).

		MC [%]	$\phi$	H <sub>2</sub> [%]	CO [%]	CO <sub>2</sub> [%]	CH <sub>4</sub> [%]	N <sub>2</sub> [%]	Error Prom [%]
1	Experimental			13	19,1	10,7	1,2	56	
	Modelo	12,5	0,375	15,4	20,0	10	0,9	53,6	
	% Error			18,5%	4,9%	6,5%	20,8%	4,3%	11,0%
2	Experimental			12,7	22,1	10,5	1,3	53,4	
	Modelo	13,8	0,324	14,86	23,39	9,489	1,25	51,01	
	% Error			17,0%	5,8%	9,6%	3,8%	4,4%	8,1%
3	Experimental			12,5	18,9	8,5	1,2	59,1	
	Modelo	14	0,364	13,8	19,8	9,2	1,1	55,9	
	% Error			10,4%	5,1%	8,3%	2,5%	5,3%	6,3%
4	Experimental			17,2	19,4	9,7	1,1	52,6	
	Modelo	14,7	0,377	19,6	20,4	9,3	0,9	49,6	
	% Error			13,9%	5,4%	4,1%	10,0%	5,5%	7,8%
5	Experimental			15,5	19,1	11,4	1,1	52,9	
	Modelo	14,7	0,296	16,3	20,2	10,1	1,1	52,1	
	% Error			5,1%	5,8%	10,8%	5,4%	1,3%	5,7%
6	Experimental			13,2	19,7	10,8	1,3	55	
	Modelo	15,2	0,337	14,3	20,8	9,6	1,2	53,9	
	% Error			8,3%	5,9%	10,6%	3,8%	1,9%	6,1%
7	Experimental			18,3	20,2	9,7	1,1	50,7	
	Modelo	16	0,350	19,6	20,5	9,6	1,0	49,1	
	% Error			7,2%	1,5%	0,1%	6,3%	3,1%	3,6%
8	Experimental			17	18,4	10,6	1,3	52,7	
	Modelo	16	0,312	18,3	19,7	10,1	1,2	50,5	
	% Error			7,8%	7,2%	3,9%	6,9%	4,1%	6,0%
9	Experimental			17,2	19,6	9,9	1,4	51,9	
	Modelo	18,5	0,323	18,6	21,9	10,5	1,3	47,5	
	% Error			8,4%	11,8%	6,8%	7,1%	8,4%	8,5%

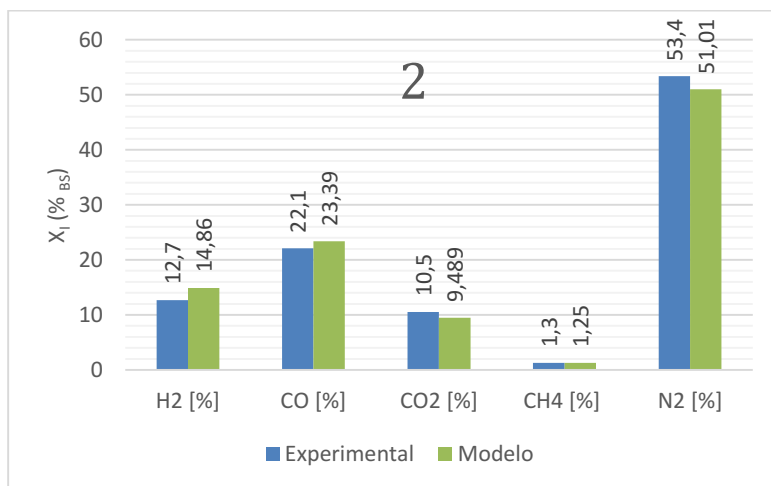
**Fuente:** (Jayah, Aye, Fuller, & Stewart, 2003)

Bajo diferentes parámetros de proceso que se mencionan en la tabla anterior, el error promedio varía entre 3% y 11%, el error en la predicción del H<sub>2</sub> varía 5,10% y 18,54%. De la misma manera, el error en la predicción de CO se encuentra entre 1,58% y 5,84%, para el CO<sub>2</sub> está entre 0,36% y

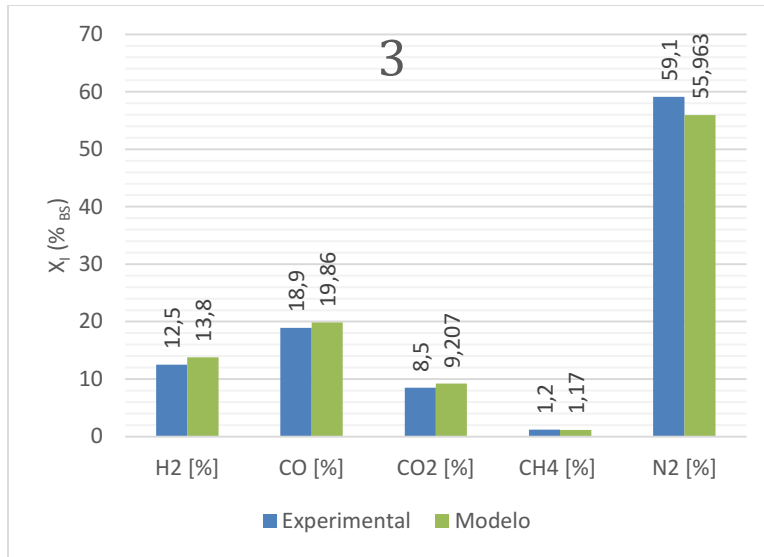
10,88%, la composición de CH<sub>4</sub> se predice con una precisión entre 79,17% y 97,5%, mientras que la precisión del N<sub>2</sub> está entre 91,58% y 98,64%. La precisión se calculó utilizando la ecuación (6.02). En las siguientes figuras se puede observar un poco más claro la diferencia entre los datos experimentales los predichos en el modelo.



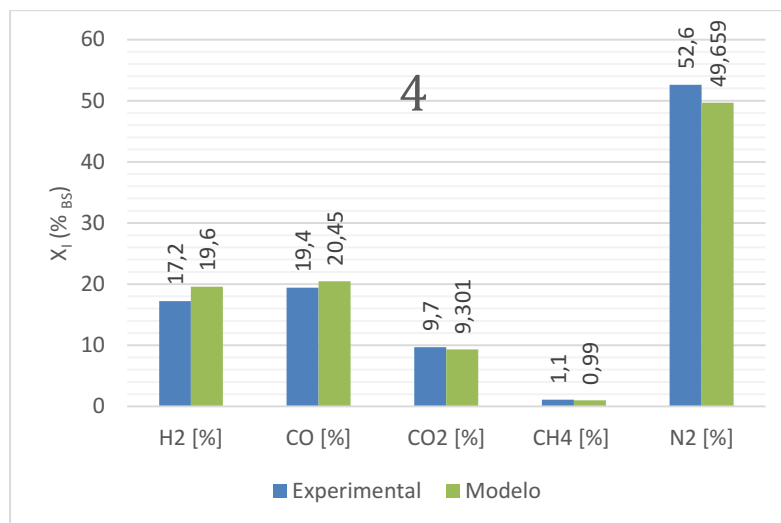
**Figura 5.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 12,5 y  $\varphi$ : 0,375.



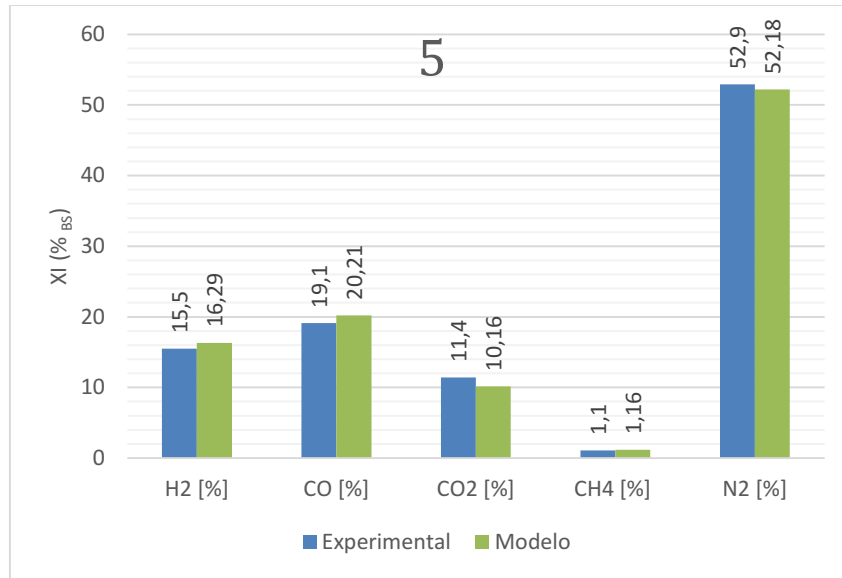
**Figura 6.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 13,8 y  $\varphi$ : 0,324.



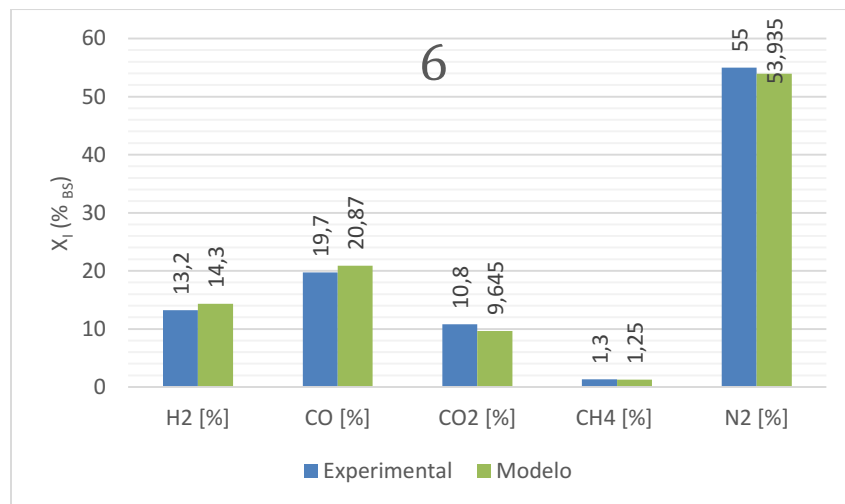
**Figura 7.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14 y  $\phi$ : 0,364.



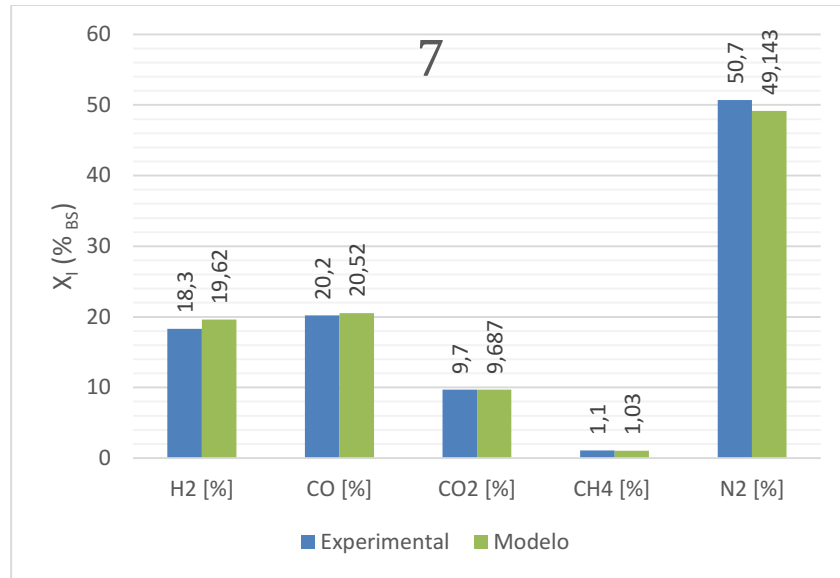
**Figura 8.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14,7 y  $\phi$ : 0,377.



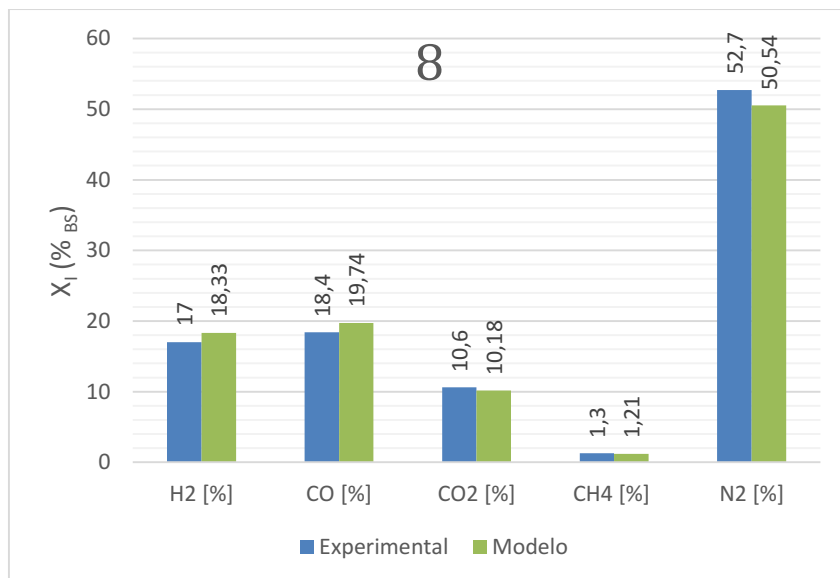
**Figura 9.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 14,7 y  $\phi$ : 0,296.



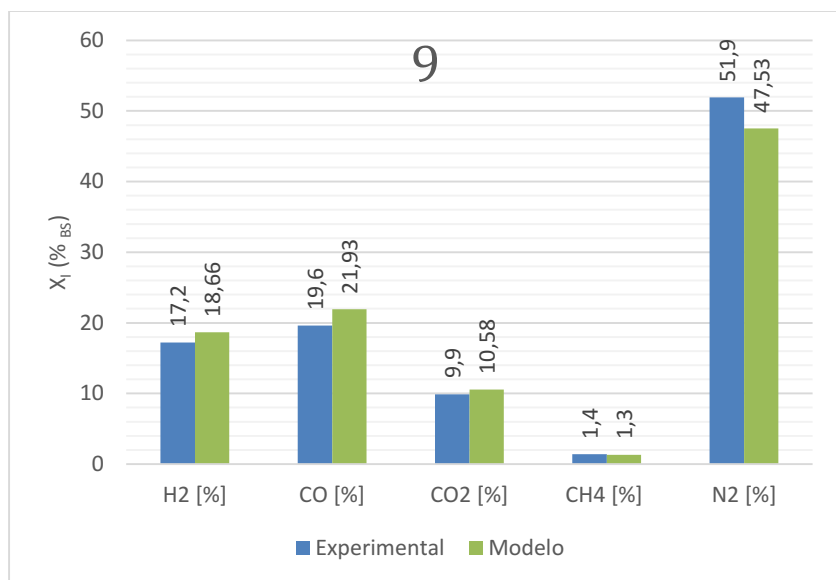
**Figura 10.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 15,2 y  $\phi$ : 0,337.



**Figura 11.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 16 y  $\phi$ : 0,35.



**Figura 12.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 16 y  $\phi$ : 0,312.



**Figura 13.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 18,5 y  $\phi$ : 0,323.

Para aumentar la fiabilidad del modelo, también se validaron los datos experimentales reportados por (Barrio M. , 2002). Al igual que el anterior se validó bajo los mismos parámetros de proceso contenido de humedad y relación de equivalencia, rectificando los datos reportados en esta bibliografía se detectó que los balances de masa no cierran, por lo cual solo se tuvo en cuenta la composición del gas obtenido y el poder calorífico. Los resultados obtenidos se resumen en la Tabla 8.

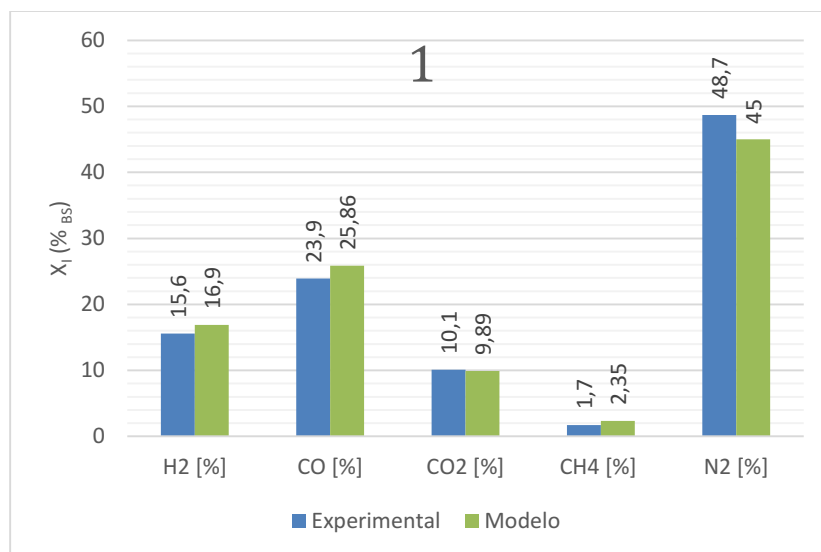
**Tabla 8.** Comparación composición de gas (Barrio M., 2002).

		MC [%]	$\varphi$	H2 [%]	CO [%]	CO2 [%]	CH4 [%]	N2 [%]	Error Prom [%]
1	Experimental	6,38	0,259	15,6	23,9	10,1	1,7	48,7	
	Modelo			16,9	25,8	9,8	2,3	45,0	
	% Error			7,6%	7,5%	2,1%	27,6%	8,2%	10,66%
2	Experimental	6,66	0,254	16,4	25,3	9,4	1,5	47,4	
	Modelo			17,8	25,8	9,1	2,2	45,1	
	% Error			8,1%	1,9%	4,2%	32,1%	5,0%	10,30%
3	Experimental	6,89	0,266	16,5	25,3	9,3	1,4	47,3	
	Modelo			17,9	25,6	8,9	2,0	45,4	
	% Error			8,0%	1,2%	3,7%	31,4%	4,1%	9,71%
4	Experimental	7,01	0,262	16,4	25,2	9,4	1,5	47,5	
	Modelo			18,0	25,6	8,9	2,2	45,1	
	% Error			9,1%	1,5%	4,9%	32,4%	5,1%	10,65%
5	Experimental	7,25	0,239	16,8	25,8	9,1	1,5	46,8	
	Modelo			18,4	25,6	8,9	2,1	44,8	
	% Error			8,7%	0,5%	1,8%	31,1%	4,4%	9,34%
6	Experimental	7,57	0,227	16,4	25,2	9,4	1,6	47,5	
	Modelo			17,7	25,5	9,3	2,3	45,0	
	% Error			7,3%	1,5%	1,06%	32,3%	5,4%	9,55%
7	Experimental	7,69	0,216	16,1	24,7	9,7	1,6	47,9	
	Modelo			17,5	25,5	9,6	2,3	44,8	
	% Error			8,3%	3,4%	0,9%	32,0%	6,6%	10,28%
8	Experimental	8	0,237	17,2	26,4	8,8	1,4	46,3	
	Modelo			18,9	25,3	9,2	2,1	44,3	
	% Error			9,3%	4,1%	4,4%	34,8%	4,4%	11,43%

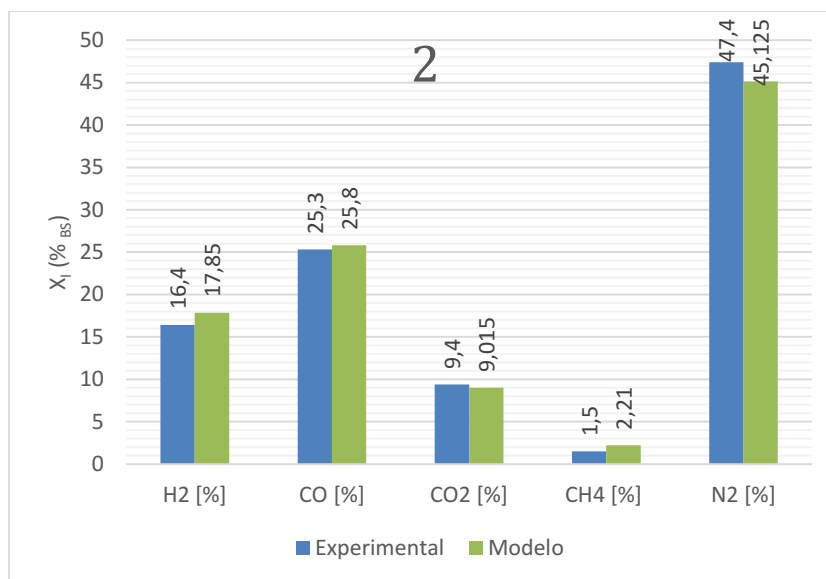
**Fuente:** (Barrio M. , 2002).

El contenido de humedad se varió entre 6,38% y 8%, y la relación de equivalencia entre 0,216 y 0,266. El error promedio entre los datos experimentales y las predicciones del modelo son menores al 15%. En las siguientes figuras se muestran la validación de los datos.

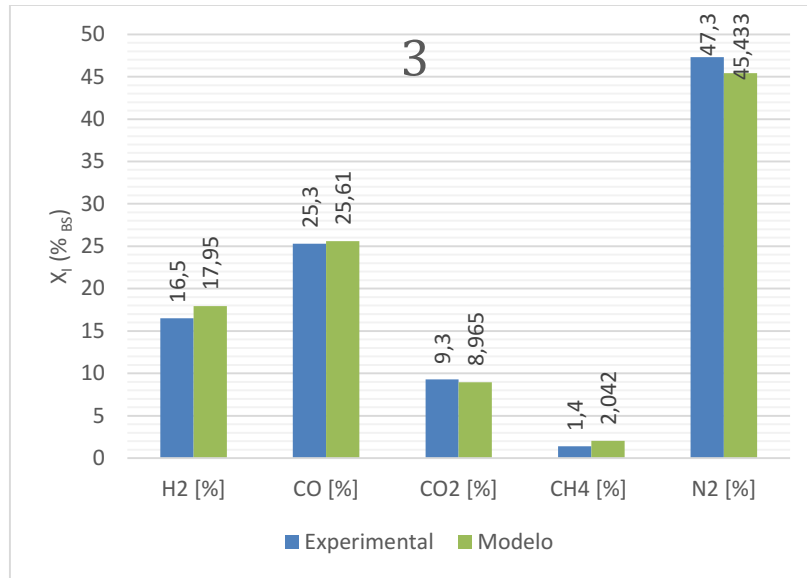




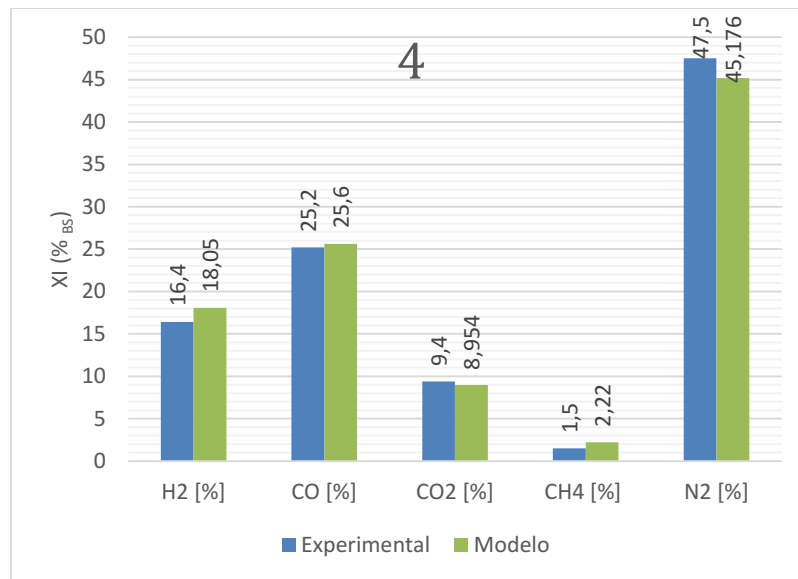
**Figura 14.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,38 y  $\phi$ : 0,259.



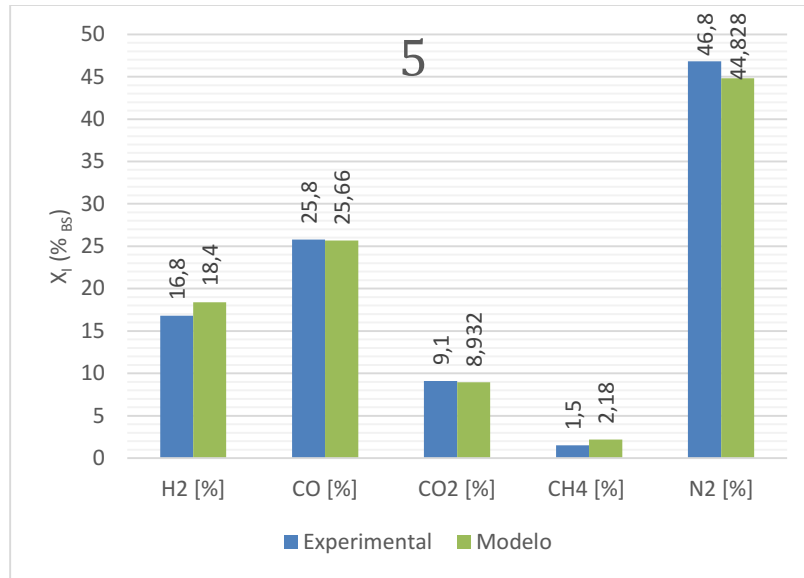
**Figura 15.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,66 y  $\phi$ : 0,254.



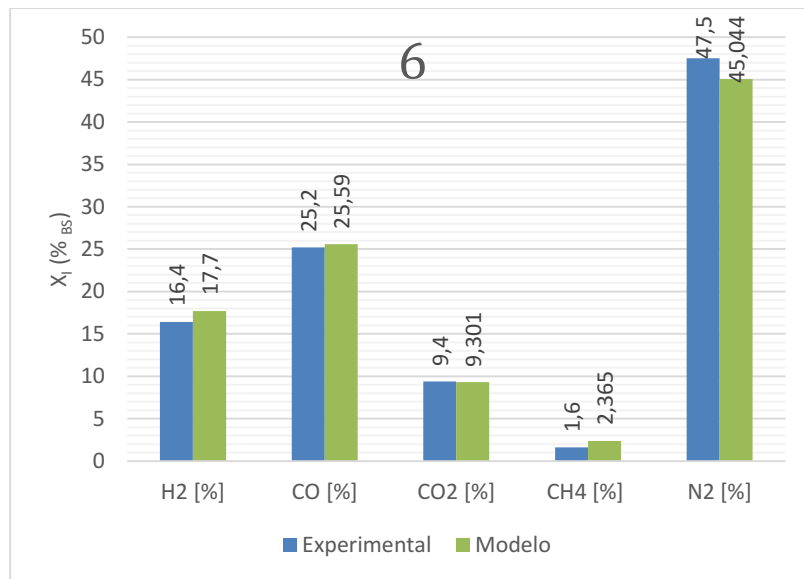
**Figura 16.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 6,89 y  $\phi$ : 0,266.



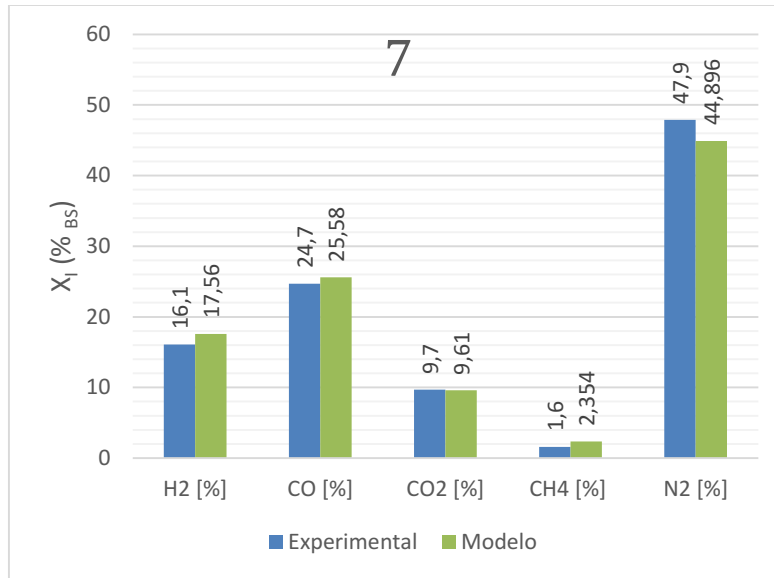
**Figura 17.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,01 y  $\phi$ : 0,262.



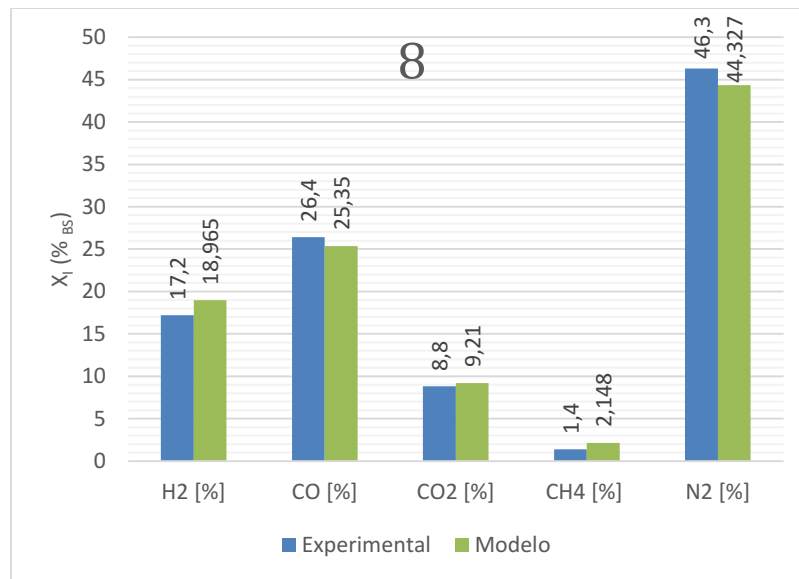
**Figura 18.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,25 y  $\varphi$ : 0,239.



**Figura 19.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,57 y  $\varphi$ : 0,227.



**Figura 20.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 7,69 y  $\phi$ : 0,216.



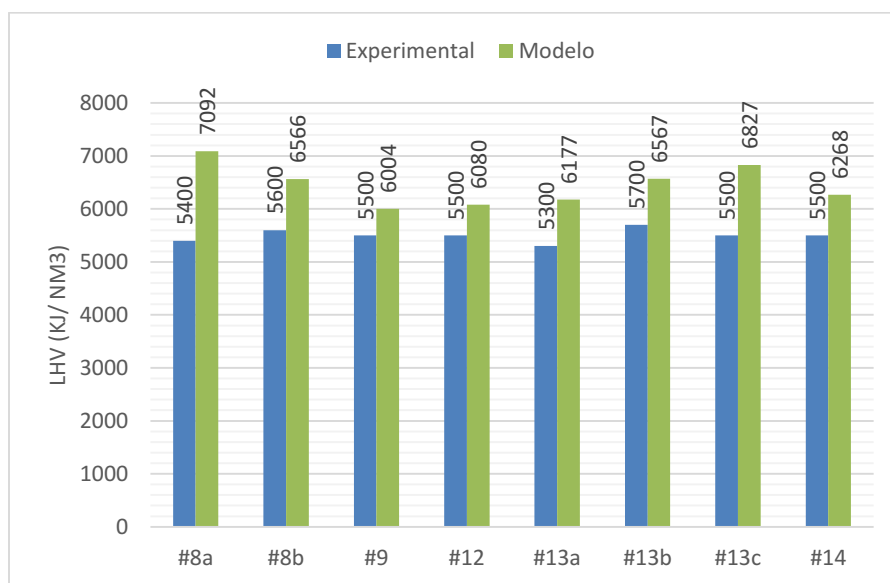
**Figura 21.** Comparación datos experimentales y modelo, con MC: 8 y  $\phi$ : 0,237.

## 7.2. Comparación del poder calorífico inferior.

Otras propiedades importantes del proceso de gasificación es el poder calorífico, es pertinente la comparación entre los datos reportados y los predichos por el modelo, en la Tabla 9 se observa la comparación su respectivo error. En la figura XX se puede observar de una manera más clara.

**Tabla 9.** Comparación de poder calorífico inferior, eficiencia de gas frío y pérdidas de calor

		#8a	#8b	#9	#12	#13a	#13b	#13c	#14	Error Prom [%]
LHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]	Experimental	5400	5600	5500	5500	5300	5700	5500	5500	
	Modelo	7092	6566	6004	6080	6177	6567	6827	6268	
% Error		23,86%	14,71%	8,39%	9,54%	14,20%	13,20%	19,44%	12,25%	14,45%



**Figura 22.** Comparación de los LHV de los datos experimentales de (Barrio M. , 2002) y los predichos por el modelo.

Aunque no se pudo comparar la temperatura del proceso, ya que en ninguna de las referencias seleccionadas la reportan, la validación realizada a las composiciones y poder calorífico, variando diferentes parámetros de proceso fueron aceptables. Por lo tanto, el presente modelo puede ser empleado para predecir composiciones de cualquier proceso de gasificación con la certeza que lo predicho es confiable.

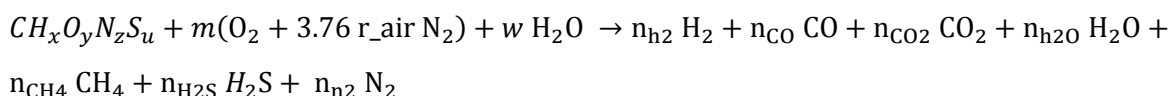
## 8. APLICACIÓN DEL MODELO AL CASO DE LA GASIFICACIÓN DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES DE *SACHA INCHI*.

La *Sacha inchi* es una planta oleaginosa de crecimiento voluble, abundantes hojas, flores pequeñas y frutos en forma de estrella y color marrón oscuro. Sus frutos se desagregan en cáscaras, cascarillas y almendra, de donde sale los desechos para la gasificación y posteriormente puede utilizarse como combustible para un motor de combustión interna y generar energía eléctrica. La almendra es llevada a otro proceso donde se le extrae el aceite, un aceite rico en omegas 3, 6 y 9 (Figura 23).



**Figura 23.** Residuos agroindustriales del proceso de descascarado de *Sacha inchi*.

Con el modelo validado se predijeron las composiciones de salida del proceso de gasificación de los desperdicios generados en el proceso de transformación de los frutos de sacha inchi. En este proceso se contemplan parámetros similares a los utilizados en la validación como contenido de humedad, relación de equivalencia y adicional la variable relación de aire que se refiere a la cantidad de oxígeno que se aporta con aire. Esta variable va de cero a uno, donde cero es oxígeno de una fuente diferente al aire y uno es oxígeno del aire. Para este caso la reacción general cambia como se muestra a continuación.

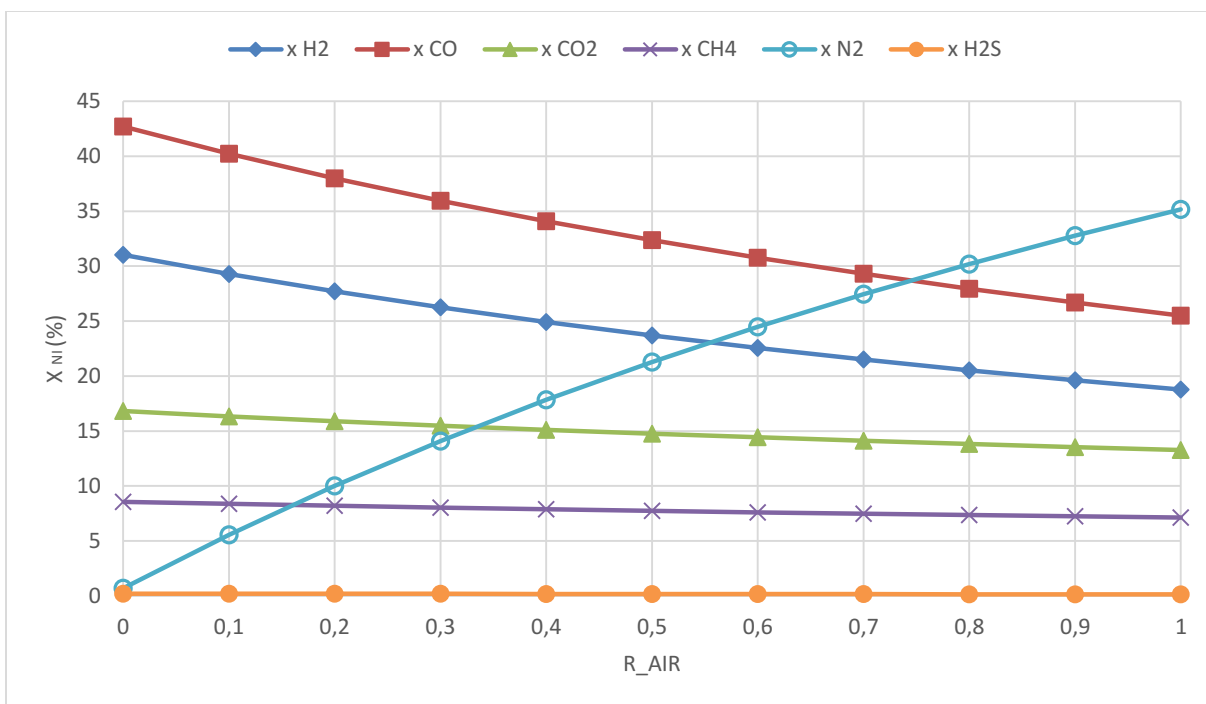


Al igual que con las referencias bibliográficas se tiene un análisis elemental y próximo de la biomasa que se resume en la Tabla 10.

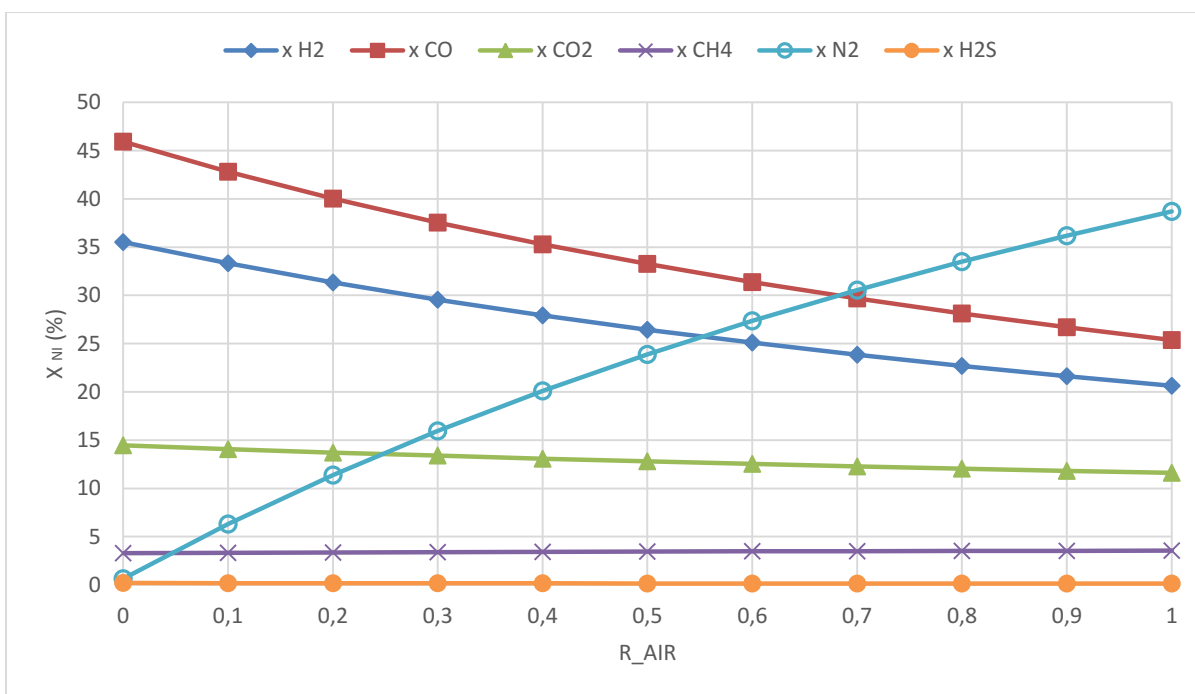
**Tabla 10.** Análisis último y próximo de los residuos de descascarados de la sachá inchi

<b>Parámetros</b>	
<b>Biomasa</b>	Sachá Inchi
<b>Análisis último</b>	
<b>C</b>	48,12%
<b>H</b>	5,18%
<b>N</b>	1,12%
<b>S</b>	0,39%
<b>O</b>	42%
<b>ASH</b>	2,85%
<b>Humedad (MC) (%bs)</b>	8,93%
<b>Poder calorífico (MJ/kg)</b>	14,362

El contenido de humedad (MC) se dejó el fijo, la relación de equivalencia se varió cinco valores dentro del rango reportado por la literatura como apropiado para gasificar y la relación de aire se varió desde cero hasta uno. Se hicieron gráficas donde se mira el cambio de las composiciones de cada uno de los gases en base seca contra la relación de aire a las diferentes relaciones de equivalencia.

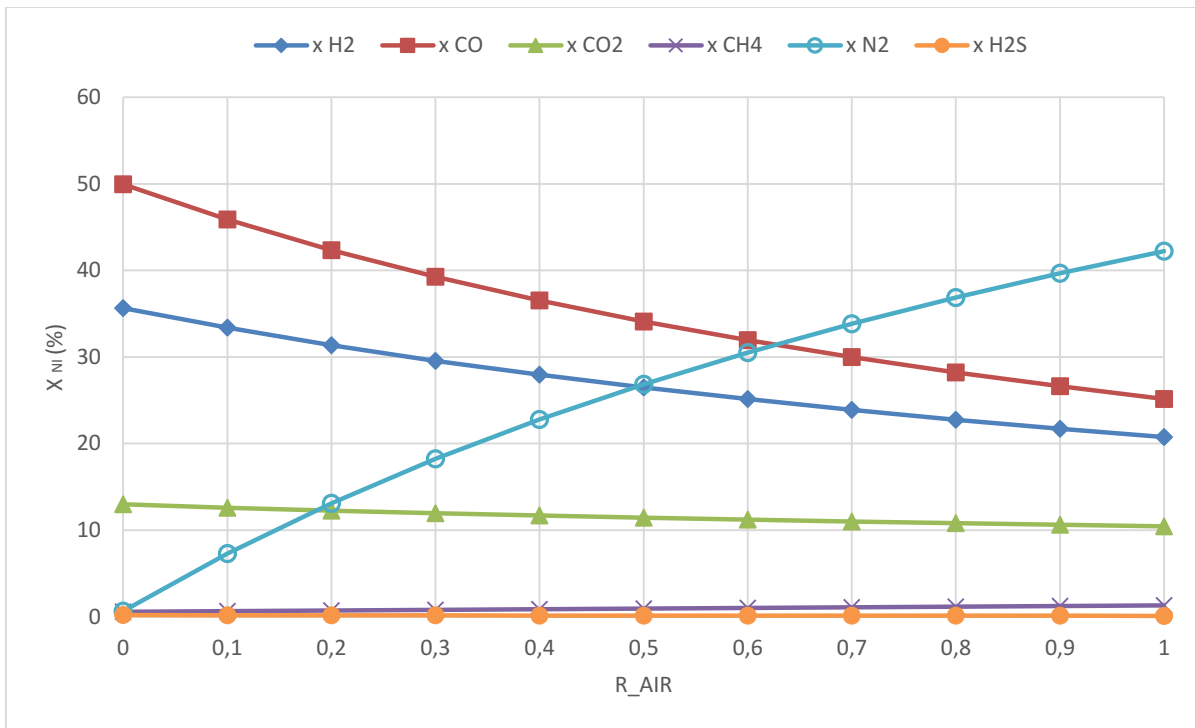


**Figura 24.** Relación de reacción con aire  $R_{air}$  vs fracción molar  $x_i$ ,  $\phi$ : 0,2 y MC: 8,93%.

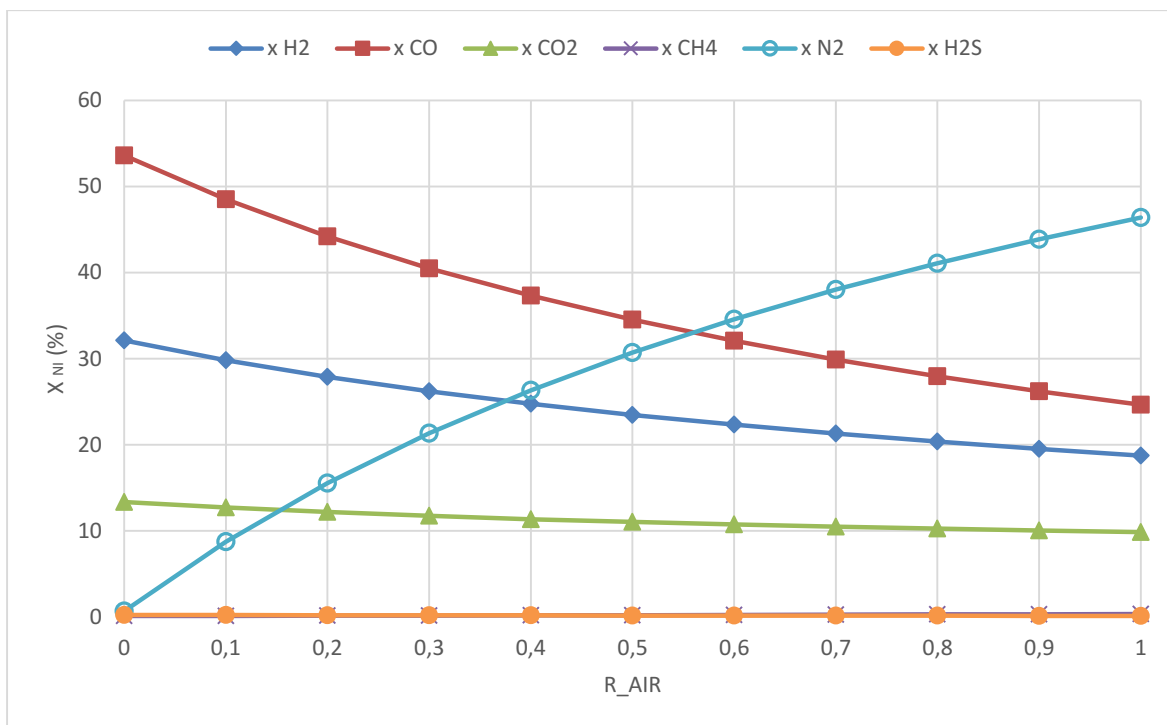


**Figura 25.** Relación de reacción con aire vs fracción molar  $x_i$ ,  $\phi$ : 0,25 y MC: 8,93%.



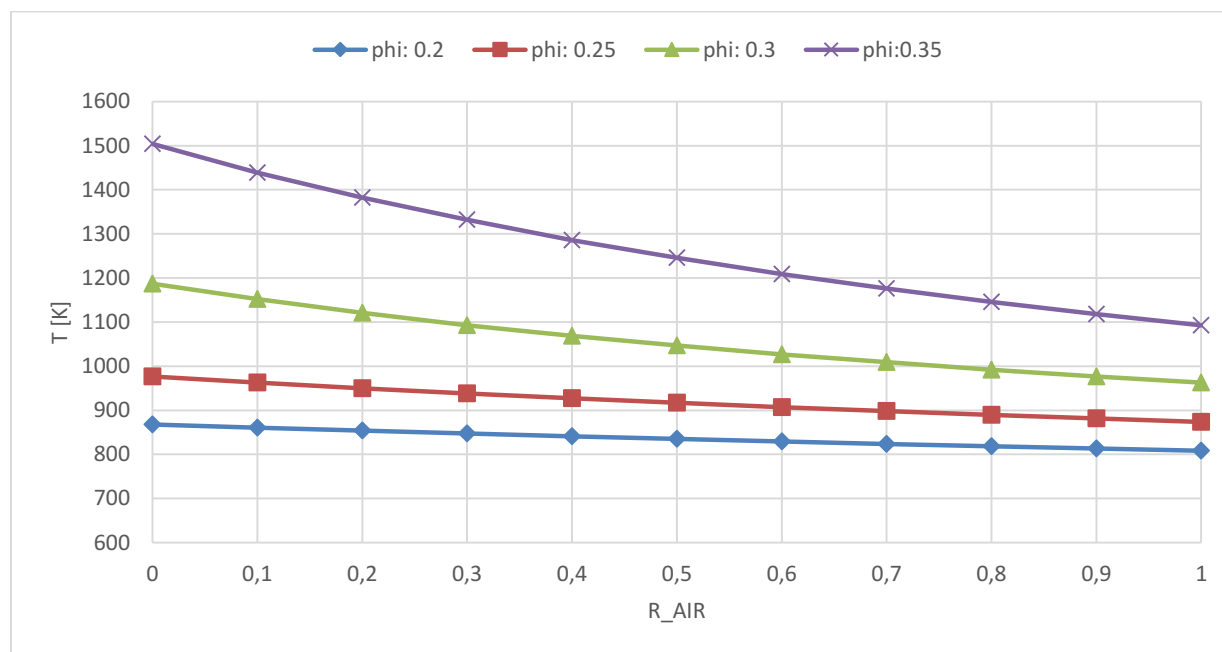


**Figura 26.** Relación de reacción con aire vs fracción molar  $x_i$ ,  $\varphi$ : 0,3 y MC: 8,93%.



**Figura 27.** Relación de reacción con aire vs fracción molar  $x_i$ ,  $\varphi$ : 0,35 y MC: 8,93%.

En las figuras se puede observar como es la tendencia del comportamiento de las composiciones de los gases con el cambio en la relación de aire a diferentes relaciones de equivalencia. La cantidad de nitrógeno que ingresa con el cambio de la relación de aire no solo afecta las composiciones, sino que también afecta a la temperatura a la cual salen los gases como se puede ver en la Figura 28, y a su vez afecta el poder calorífico y la eficiencia de gas frío.



**Figura 28.** Temperatura de proceso vs relación de reacción con aire, a diferente  $\phi$  y MC: 8,93%.

Una vez mostradas las tendencias de las composiciones molares de los gases, se muestran en las Tabla 11, 16 y 17 más adelante algunas predicciones del proceso de gasificación, donde la relación de equivalencia está en el rango recomendado por algunos autores que es entre 0,25 y 0,35, se tomaron puntos intermedios de la relación de aire y utilizando el modelo desarrollado se predijo la composición base seca de gases, temperatura de salida, poder calorífico inferior y superior y eficiencia de gas frío.

**Tabla 11.** Variables del proceso de gasificación de Sacha inchi con phi: 0,25 y MC: 8,93%.

		Relación de reacción con aire r <sub>air</sub>				
		0	0,25	0,5	0,75	1
x base húmeda [%]	H <sub>2</sub>	33,13	28,73	25,2	22,32	19,91
	CO	42,83	36,59	31,68	27,72	24,48
	CO <sub>2</sub>	13,48	12,79	12,19	11,66	11,2
	H <sub>2</sub> O	6,73	5,59	4,73	4,06	3,52
	CH <sub>4</sub>	3,06	3,19	3,29	3,37	3,42
	H <sub>2</sub> S	0,18	0,160	0,14	0,13	0,12
	N <sub>2</sub>	0,59	12,95	22,76	30,74	37,35
x base seca [%]	H <sub>2</sub>	35,52	30,43	26,45	23,26	20,64
	CO	45,92	38,75	33,25	28,9	25,37
	CO <sub>2</sub>	14,45	13,55	12,8	12,16	11,61
	CH <sub>4</sub>	3,28	3,38	3,46	3,51	3,55
	H <sub>2</sub> S	0,19	0,169	0,15	0,1354	0,12
	N <sub>2</sub>	0,63	13,71	23,89	32,04	38,71
T [K]		976,3	943,9	916,9	893,8	873,7
LHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		9619	8482	7576	6838	6224
HHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		10521	9281	8663	7487	6819
n <sub>cg</sub> [%]		86,82	86,46	86,09	85,7	85,31

**Tabla 12.** Variables del proceso de gasificación de Sacha inchi con phi: 0,3 y MC: 8,93%.

Relación de reacción con aire r <sub>air</sub>		0	0,25	0,5	0,75	1
x <sub>i</sub> base húmeda [%]	H <sub>2</sub>	31,73	27,79	24,61	21,96	19,71
	CO	44,46	37,2	31,69	27,38	23,91
	CO <sub>2</sub>	11,55	11,06	10,64	10,27	9,92
	H <sub>2</sub> O	11	8,71	7,08	5,88	4,97
	CH <sub>4</sub>	0,53	0,7	0,89	1,07	1,24
	H <sub>2</sub> S	0,17	0,150	0,13	0,12	0,11
	N <sub>2</sub>	0,56	14,37	24,95	33,32	40,13
xi base seca [%]	H <sub>2</sub>	35,65	30,45	26,49	23,33	20,74
	CO	49,96	40,75	34,11	29,09	25,16
	CO <sub>2</sub>	12,98	12,12	11,45	10,91	10,44
	CH <sub>4</sub>	0,59	0,7	0,96	1,14	1,3
	H <sub>2</sub> S	0,19	0,16	0,14	0,13	0,11
	N <sub>2</sub>	0,63	15,75	26,85	35,41	42,24
T [K]		1187	1107	1047	1000	962,8
LHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		8479	7356	6494	5809	5251
HHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		9338	8100	7151	6398	5784
n <sub>cg</sub> [%]		80,36	80,5	80,51	80,41	80,23

**Tabla 13.** Variables del proceso de gasificación de Sacha inchi con phi: 0,35 y MC: 8,93%.

Relación de reacción con aire $r_{air}$		0	0,25	0,5	0,75	1
$x_i$ base húmeda [%]	H <sub>2</sub>	26,84	23,5	21,03	19,06	17,42
	CO	44,81	36,81	30,93	26,44	22,89
	CO <sub>2</sub>	11,15	10,39	9,87	9,47	9,14
	H <sub>2</sub> O	16,4	12,91	10,37	8,47	7,01
	CH <sub>4</sub>	0,08	0,12	0,16	0,23	0,31
	H <sub>2</sub> S	0,17	0,140	0,12	0,11	0,1
	N <sub>2</sub>	0,56	16,13	27,51	36,23	43,13
$x_i$ base seca [%]	H <sub>2</sub>	32,1	26,98	23,46	20,83	18,73
	CO	53,59	42,27	34,51	28,88	24,62
	CO <sub>2</sub>	13,34	11,93	11,01	10,35	9,832
	CH <sub>4</sub>	0,09881	0,13	0,182	0,25	0,3299
	H <sub>2</sub> S	0,2037	0,17	0,1389	0,12	0,1057
	N <sub>2</sub>	0,6686	18,52	30,7	39,58	46,38
T [K]		1504	1356	1246	1160	1093
LHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		7470	6349	5529	4902	4404
HHV [kJ/Nm <sup>3</sup> ]		8322	7068	6152	5451	4895
$n_{cg}$ [%]		71,44	71,9	72,33	72,69	72,93

## 9. CONCLUSIONES

En este trabajo se planteó y se desarrolló un modelo matemático simple tipo 0-D, para la estimación de la composición en base seca y base húmeda, la temperatura y el poder calorífico del gas de obtenido en el proceso de gasificación de biomasa mediante balances de masa y energía, y constantes de equilibrio. El *software* empleado EES se selección debido a sus capacidades en el manejo de las bases de datos para cada una de las sustancias presentes en el gas.

El modelo ha sido validado con datos experimentales reportados en la literatura técnica, la composición del gas, la temperatura salida, el poder calorífico del gas producido fueron comparados. El error promedio de las composiciones de los gases varía entre el 3% y el 11%, presentándose más error en la composición de metano debido a que sus bajas concentraciones cualquier cambio en está aumentaría el error. Para la comparación del poder calorífico el error promedio varía entre el 8% y 23%, con estos resultados el modelo predice valores aceptables para diferentes tipos de biomasa con diferentes parámetros de entrada.

Los valores de poder calorífico obtenidos de forma numérica no presentan diferencias significativas con los reportados en la literatura y obtenidos de forma experimental en la literatura técnica tomada como referencia. Los valores obtenidos se encuentran en un intervalo aceptable para la realización del proceso con aire como agente de reacción en un gasificador de corrientes paralelas.

La utilización del modelo para predecir el proceso de gasificación de residuos de *Sacha inchi*, la variación en la relación de reacción con aire como parámetro de entrada del proceso, altos valores en la relación de reacción con aire pueden dar origen a múltiples desventajas; una de ellas es la reducción de las fracciones molares de los gases combustibles como CO y H<sub>2</sub> contenidos en el gas producido. Esto se ve reflejado en la disminución del poder calorífico del gas, la temperatura de salida y la eficiencia de gas frío.

La concentración de nitrógeno en el gas producido se ve directamente afectada por la relación de reacción con aire, a medida que aumenta la relación aumenta la concentración y viceversa. El aumento de nitrógeno disminuye la temperatura, el poder calorífico y a su vez la eficiencia del proceso.

## 10. BIBLIOGRAFÍA

- Altafini, C., Wander, P., & Barreto, R. (2003). Prediction of the working parameters of a wood waste gasifier through an equilibrium model. *Energy Conversion and Management*, 2763–2777.
- Babu, B., & Sheth, P. (2006). Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: Effect of char reactivity factor. *Energy Conversion and Management*, 2602-2611.
- Bain, R., & Broer, K. (2011). Gasification. En R. Brown, *Thermochemical processing of biomass* (págs. 47-78). Wiley.
- Barman, N., Ghosh, S., & De, S. (2012). Gasification of biomass in a fixed bed downdraft gasifier - A realistic model including tar. *Bioresource technology*, 505-511.
- Barrio, M. (2002). *Experimental investigation of small-scale gasification of woody biomass*. Trondheim, Norway.
- Barrio, M., Fossum, M., & Hustad, J. (2001). A small-scale stratified downdraft gasifier coupled to a gas engine for combined heat and power production. *Norwegian University of science and technology*, 426-440.
- Basu, P. (2013). *Biomass gasification, pyrolysis and torrefaction*. Londres : Elsevier.
- Bhavanam, A., & Sastry, R. (2011). Biomass Gasification Processes in Downdraft Fixed Bed Reactors: A Review. *Internacional journal of chemical engineering and applications*, 425-433.
- Blasi, C. (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical engineering science*, 2931-2944.
- Blasi, C., & Branca, C. (2013). Modeling a stratified downdraft wood gasifier with primary and secondary air entry. *Fuel*, 847-860.
- Bridgwater, A. (2001). *Progress in thermochemical biomass conversion*. Birmingham: Blackwall science.
- Channiwala, S., & Parikh, P. (2002). A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid, and gaseous fuels. *Fuel*, 1051-1063.
- Chern, S.-M. (1989). Mass and energy balance analyses of a downdraft gasifier . *Biomass*, 127-151.
- Chern, S.-m., Walawender, W., & Fan, L. (1991). Equilibrium modeling of a downdraft gasifier I-overall gasifier. *Chemical Engineering Communications*, 243-265.
- Di Blasi, C. (2009). Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars. *Progress in energy and combustion science*, 121-140.
- Engineering Equation Solver. (20 de Octubre de 2016). *F-chart software*. Obtenido de <http://www.fchart.com/ees/>

- FAO Forestry Paper. (1986). *Wood gas as engine fuel*. Rome: Food and agriculture organization of the united nations.
- Gasification Thecnologies Council. (10 de Mayo de 2015). *Gasification Technologies Council* . Obtenido de <http://www.gasification.org/>
- Giltrap, D., McKibbin, R., & Barnes, G. (2003). A steady state model of gas-char reactions in a downdraft biomass gasifier. *Solar Energy*, 85-91.
- Gordillo, E., & Belghit, A. (2011). A downdraft high temperature steam-only solar gasifier of biomass char: A modelling study. *Biomass and bioenergy*, 2034-2043.
- Guardo, A., Coussirat, M., Recasens, F., Larrayoz, M., & Escaler, X. (2006). CFD study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: Convective heat transfer and high pressure. *Chimical Engineering Science*, 4341-4353.
- Higman, C., & Van der Burgt, M. (2003). *Gasification*. Burlington, MA: Elsevier.
- Itai, Y., Santos, R., Branquinho, M., Malico, I., & Ghesti, G. (2014). Numerical and experimental assessment of a downdraft gasifier for electric power in Amazon using açai seed (*Euterpe oleracea* Mart.) as a fuel. *Renewable energy*, 662-669.
- Jaojarruek, K., & Kumar, S. (2009). Numerical simulation of the pyrolysis zone in a downdraft gasification process. *Bioresource technology*, 6052-6058.
- Jarungthammachote, S., & Dutta, A. (2007). Thermodynamic equilibrium model and second law analysis of a downdraft waste gasifier. *Energy*, 1660-1669.
- Jayah, T., Aye, L., Fuller, R., & Stewart, D. (2003). Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying. *Biomass and Bioenergy*, 459-469.
- Kramreiter, R., Url, M., Kotik, J., & Hofbauer, H. (2008). Experimental investigation of a 125 kW twin-fire fixed bed gasification pilot plant and comparison to the results of a 2 MW combined heat and power plant (CHP). *Fuel processing technology*, 90-102.
- Kuo, P.-C., Wu, W., & Chen, W.-H. (2014). Gasification performances of raw and torrefied biomass in a downdraft fixed bed gasifier using thermodynamics analysis. *Fuel*, 1231-1241.
- Li, X., Grace, J., Lim, C., Watkinson, A., Chen, H., & Kim, J. (2004). Biomass gasification in a circulating fluidized bed. *Biomass and Bioenergy*, 171-193.
- Li, X., Grace, J., Watkinson, A., Lim, C., & Ergüdenler, A. (2001). Equilibrium modeling of gasification: a free energy minimization approach and its application to a circulating fluidized bed coal gasifier. *Fuel*, 195-207.
- Logtenberg, S., & Dixon, A. (1998). Computational fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer. *Chemical engineering and processing*, 7-21.



- Mathieu, P., & Dubuisson, R. (2002). Performance analysis of a biomass gasifier. *Energy Conversion and Management*, 1291-1299.
- McKendry, P. (2002). Energy production from biomass (part 1): overview of biomass. *Bioresource Technology*, 37-46.
- McKendry, P. (2002). Energy production from biomass (part 3): gasification technologies. *Bioresource Technology*, 55-63.
- Melgar, A., Pérez, J., Laget, H., & Horillo, A. (2007). Thermochemical equilibrium modelling of a gasifying process. *Energy Conversion and Management*, 59-67.
- Milligan, J. (1994). *Downdraft gasification of biomass ( Doctor of Philosophy)*. Birmingham: The University of Anston.
- Nikrityuk, P., Föster, T., & Meyer, B. (2014). Modeling of gasifiers: Overview of current developments. En P. Nikrityuk , & B. Meyer, *Gasification processes: modeling and simulation* (págs. 1-24). Weinheim: Wiley-VCH.
- Patra, T., & Seth, P. (2015). Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-art review. *Renewable and sustainable Energy Reviews*, 583-593.
- Pérez Bayer, J. F. (2009). *Gasificación de biomasa estudios teórico-experimentales en lecho fijo equicorriente*. Medellín: Universidad de Antioquia .
- Ptasinski, K., Prins, M., & Pierik, A. (2007). Exergetic evaluation of biomass gasification. *Energy*, 568-574.
- Puig-Arnabat, M., Bruno, J. C., & Coronas, A. (2010). Review and analysis of biomass gasification models. *Renewable and sustainable energy reviews*, 2841-2861.
- Rajvanshi, A. (1986). Biomass gasification. En D. Goswami, *Alternative energy in agriculture, vol. II*. (págs. 83-102). Greensboro: CRC.
- Ratnadhariya, J., & Channiwala, S. (2009). Three zone equilibrium and kinetic free modeling of biomass gasifier - anovel approach. *Renewable energy*, 1050-1058.
- Reed, T., & Das, A. (1988). *Handbook of biomass downdraft gasifier engine systems*. Golden, Colorado: Solar technical information program.
- Reklaitis, G. (1983). *Introduction to material and energy balance*. Wiley: New york.
- Sharma, A. (2008). Equilibrium and kinetic modeling of char reduction reactions in a downdraft biomass gasifier: A comparision. *Solar energy*, 918-928.
- Sharma, A. (2009). Experimental study on 75 kWth downdraft (biomass) gasifier system. *Renewable energy*, 1726-1733.

- Sharma, A. (2011). Modeling and simulation of a downdraft biomass gasifier 1. Model development and validation. *Energy Conversion and Management*, 1386-1396.
- Sheth, P., & Babu, B. (2009). Experimental studies on producer gas generation from wood waste in a downdraft biomass gasifier. *Bioresouce Techhnology*, 3127-3133.
- Silva, V., & Rouboa, A. (2013). Using a two-stage equilibrium model to simulate oxygen air enriched gasification of pine biomass residues. *Fuel Processing Technology*, 111-117.
- Simone, M., Nicolella, C., & Tognotti, L. (2013). Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of woody residues. *Bioresource technology*, 92-101.
- Skehar Barman, N., Ghosh, S., & De, S. (2012). Gasification of biomass in a fixed bed downdraft gasifier - A realistic model including tar. *Bioresource Technology*, 505-511.
- Solar Energy Research Institute. (1979). *Generator gas, The Swedish experience from 1939-1945*. Golden, Colorado: Biomass Energy Foundation.
- Straka, P., & Bucko, Z. (2009). Co-gasification of a lignite/waste-tyre mixture in a moving bed. *Fuel processing technology*, 1202-1206.
- Sudiro, M., Pellizzaro, M., Bezzo, F., & Bertucco, A. (2010). Simulated moving bed technology applied to coal gasification. *Chemical engineering research and design*, 465-475.
- Tinaut, F., Melgar, A., Pérez, J., & Horrillo, A. (2008). Effect of biomass particle size and air superficial velocity on the gasification process in a downdraft fixed bed gasifier. An experimental and modelling study. *Fuel processing technology*, 1076-1089.
- U.S. Energy Information Administration. (2015). *Annual Energy Outlook 2015*. Washington, DC: U.S. Department of Energy.
- Vaezi, M., Passandideh-Fard, M., Moghiman, M., & Charmchi, M. (2008). *Modeling biomass gasification: A new approach to utilize renewables sources of energy*. Boston, Massachusetts: 2008 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition.
- Van de steene, L., & Tagutchou, J. (2010). A new experimental Continuous Fixed Bed Reactor to characterise wood char gasification. *Fuel*, 3320-3329.
- Wang, Y., & Kinoshita, C. (1993). Kinetic model of biomass gasification. *Solar energy*, 19-25.
- Zainal, Z., Ali, R., Lean, C., & Seetharamu, K. (2001). Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials. *Energy Conversion and Management*, 1499-1515.

## ANEXO A

Código de EES utilizada para la predicción de las características del gas producido.

### MODELACIÓN MATEMÁTICA DE UN GASIFICADOR DE TIPO “DOWNDRAFT” PARA LA VALORIZACIÓN ENERGÉTICA.

#### MAESTRIA EN INGENIERIA

Ingeniero de Procesos: Andrés Felipe Ramírez Restrepo

Asesor: IM. Msc Luis Santiago París Londoño,  
Universidad EAFIT. Escuela de ingeniería  
Octubre 2016

```
}  
{modelo de gasificador de flujo descendente}
```

```
{Datos de referencia}
```

```
To=25[C]
```

```
Tok=(25+273,15)[K]
```

```
Po=101,325[kPa]
```

```
{Datos de la biomasa}
```

```
{Composición química del desecho sólido en peso fracciones másicas}
```

```
{Humedad de la biomasa base húmeda: mw/mtot}
```

```
{-----}
```

```
{Jayah et al, 2003. Biomasa_ Madera de caucho}
```

```
MC=7,25 [%] {Moisture content}
```

```
phi=0,245 {=ER equivalence ratio}
```

```
{Datos fracción másica de cada elemento base seca. Análisis elemental de la biomasa}
```

```
Cc=50,70[%]
```

```
Hh=6,90[%]
```

```
Nn=0,30[%]
```

```
Ox=41,71[%]
```

```
Ss=0
```

```
ASH_bm= 0,39[%]
```

```
{Cenizas}
```

```
{-----}
```

```
fm_C=Cc/100
```

```
fm_H=Hh/100
```

```
fm_O=Ox/100
```

```
fm_N=Nn/100
```

```
fm_S=Ss/100
```

```
fm_ASH=ASH_bm/100
```

$$fm\_tot = fm\_C + fm\_H + fm\_O + fm\_N + fm\_S + fm\_ASH \quad \{\text{Verificación}\}$$

{Moles de cada elemento en 1kg de biomasa}

$$n\_C = fm\_C / 12$$

$$n\_H = fm\_H / 1$$

$$n\_O = fm\_O / 16$$

$$n\_N = fm\_N / 14$$

$$n\_S = fm\_S / 32$$

$$n\_total = n\_C + n\_H + n\_O + n\_N + n\_S$$

{ kmoles totales de la biomasa en 1 kg sin ceniza }

{fraccion molar de cada elemento en la biomasa}

$$fn\_C = n\_C / n\_total$$

$$fn\_H = n\_H / n\_total$$

$$fn\_O = n\_O / n\_total$$

$$fn\_N = n\_N / n\_total$$

$$fn\_S = n\_S / n\_total$$

{Composicion química equivalente de la biomasa C Hx Oy Nz Su}

$$FQcaBMS = 'C Hx Oy Nz Su'$$

$$x = n\_H / n\_C$$

$$y = n\_O / n\_C$$

$$z = n\_N / n\_C$$

$$u = n\_S / n\_C$$

{Peso molecular equivalente}

$$PM\_eq = 12 + 1*x + 16*y + z*14 + u*32$$

{Humedad de la biomasa}

$$BH\_biomasa = MC / 100$$

$$BS\_biomasa = BH\_biomasa / (1 - BH\_biomasa)$$

{kg h2o / kg biomasa seca}

$$mw = BS\_biomasa$$

{kg h2o / kg biomasa seca}

$$w = mw * PM\_eq / 18$$

{kmoles de agua / kmol de biomasa seca}

{Estimacion del aire teorico}

{Ecuación estequiometrica biomasa equivalente:  $C Hx Oy Nz Su + a\_T (O_2 + 3.76 * r\_air N_2) \Rightarrow CO_2 + uH_2S + x/2 H_2O + (z/2 + 3.76) N_2$  }

$$a\_T = 1 + x/4 + z/2 - y/2$$

{kmoles O2 teo / kmol comb}

$$AC\_t = (1 + 3.76 * r\_air) * a\_T$$

{relacion Aire/Combustible molar (A/C)t}

molar : kmoles air/kmol comb}

{  $\phi = r\_eq = (AC\_real / AC\_teorico) = (A\_real / A\_teorico) = (m\_air-real / a\_T) = \phi$  (???)  
relacion de equivalencia  $r\_eq$  se propone entre 0.3 a 0.5 para la gasificación? }

mol\_o2 = phi \* a\_T {kmoles de o2 /kmol equiv\_biomasa para conseguir un valor de r-eq en la entrada al reactor de gasificación....}  
m = mol\_o2 { kmoles de o2 / kmol biomasa equivalente }

{Ecuacion base de gasificación: }  
{ 1 C H<sub>x</sub> O<sub>y</sub> N<sub>z</sub> S<sub>u</sub> + m (O<sub>2</sub> + 3.76\*r<sub>air</sub> N<sub>2</sub>) + w H<sub>2</sub>O ==>  
n<sub>co2</sub> CO<sub>2</sub> + n<sub>h2o</sub> H<sub>2</sub>O + n<sub>n2</sub> N<sub>2</sub> + n<sub>h2s</sub> H<sub>2</sub>S + n<sub>co</sub> CO + n<sub>h2</sub> H<sub>2</sub> + n<sub>ch4</sub> CH<sub>4</sub> +  
n<sub>o2</sub> O<sub>2</sub> }

{ r<sub>air</sub> = factor de reaccion con aire. P.e. si r<sub>air</sub>=1 el oxigeno libre es aportado solo por el aire (O<sub>2</sub>+3.76 N<sub>2</sub>),  
si r<sub>air</sub>=0 el oxigeno libre no es aportado por el aire, si 0<r<sub>air</sub><1 una fraccion del oxigeno libre se aporta con el aire y otra se aporta como O<sub>2</sub> puro }

{ r<sub>air</sub>=1 reaccion con aire}  
{ r<sub>air</sub>=0 reaccion sin aire pero con O<sub>2</sub> }

r<sub>air</sub> = 1

{Balance de masa para cada elemento}  
{Para el N} z + 2\*m\*3,76\*r<sub>air</sub> = 2\*n<sub>n2</sub>  
{Para el S} u = n<sub>h2s</sub>  
{Para el C} 1 = n<sub>co2</sub> + n<sub>co</sub> + n<sub>ch4</sub>  
{Para el H} x + 2\*w = 2\*n<sub>h2o</sub> + 2\*n<sub>h2</sub> + 4\*n<sub>ch4</sub> + 2\*n<sub>h2s</sub>  
{Para el O} y + 2\*m + w = 2\*n<sub>co2</sub> + n<sub>h2o</sub> + n<sub>co</sub> + 2\*n<sub>o2</sub>  
{kmoles totales syngas} n<sub>tot</sub> = n<sub>co2</sub> + n<sub>h2o</sub> + n<sub>n2</sub> + n<sub>h2s</sub> + n<sub>co</sub> + n<sub>h2</sub> + n<sub>ch4</sub> +  
n<sub>o2</sub>

{Presiones parciales de los gases en los productos de la reacción}

P<sub>tot</sub> = 101,325 [kPa]  
P<sub>H2</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>H2</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>CO</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>co</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>CO2</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>co2</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>H2O</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>h2o</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>CH4</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>ch4</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>H2S</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>h2s</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>N2</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>n2</sub>/n<sub>tot</sub>)  
P<sub>O2</sub> = P<sub>tot</sub>\* (n<sub>o2</sub>/n<sub>tot</sub>)

{Presiones parciales de los gases en los productos de la reacción para la tabla de resultados}

{1} Pp[1] = P<sub>h2</sub>  
{2} Pp[2] = P<sub>co</sub>  
{3} Pp[3] = P<sub>co2</sub>  
{4} Pp[4] = P<sub>h2o</sub>

```
{5} Pp[5] = P_ch4
{6} Pp[6] = P_h2s
{7} Pp[7] = P_n2
{8} Pp[8] = P_o2
```

{Nombre o Definicion de variables para la tabla de resultados}

```
{0} n$[0]='Temperatura syngas T='
{1} n$[1]='kmoles H2'
{2} n$[2]='kmoles CO'
{3} n$[3]='kmoles CO2'
{4} n$[4]='kmoles H2O'
{5} n$[5]='kmoles CH4'
{6} n$[6]='kmoles H2S'
{7} n$[7]='kmoles N2'
{8} n$[8]='kmoles O2'
```

```
Ru=R# {constante universal de los gases }
Tk=T+273,15
Tc_syngas[0]=T
Tk_syngas[0]=Tk
```

```
{-----}
{Relacion con las constantes de equilibrio}
```

```
{(1) Reaccion de Boudouard: C + O2 <=> 2CO }
{Reacción : C + 2H2 <=> CO + H2 }
{Combinacion Boudouard y water-gas shift reation WGSR: CO + H2O <=> CO2 + H2 }
```

{Coeficientes de la reaccion estequiometrica CO + H2O <=> CO2 + H2}

```
vbw_co =1
vbw_h2o =1
vbw_co2 =1
vbw_h2 =1
{Relacion K1- energia libre gibbs en equilibrio}
DELTAgo_T_1 = (vbw_h2 * go_h2_T + vbw_co2 * go_co2_T) - (vbw_co* go_co_T +
vbw_h2o*go_h2o_T)
K1_p=exp(-DELTAgo_T_1/(Ru*Tk))
K1_p * n_co * n_h2o = n_co2 * n_h2 { (1) Constante de equilibrio. Combinacion
Reacciones de Boudouard y "water-gas shift reation" }
```

{ (2) Reaccion Metanación C+2H2 <=> CH4 }

{Coeficientes de la reaccion estequiometrica de metanación: C+2H2 <=> CH4}

```
vm_ch4 =1
vm_c =1
vm_h2 =2
{Relacion K2- energia libre gibbs en equilibrio}
```

$$\begin{aligned} \text{DELTA}G_{o\_T\_2} &= (v_{m\_ch4} * g_{o\_ch4\_T}) - (v_{m\_h2} * g_{o\_h2\_T}) \\ K2\_p &= \exp(-\text{DELTA}G_{o\_T\_2}/(R_u * T_k)) \\ K2\_p * (n_{h2})^2 &= n_{ch4} * n_{tot} \end{aligned} \quad \{(2) \text{ Reaccion metanación}\}$$

{restriccion para que no salga el oxigeno...reactivo límite}

$n_{o2} = 0$  {el O2 debe ser un reactivo limite y debe consumirse completamente en el proceso de gasificación}

{Definicion de las moles  $n[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas producido por 1 kmol de biomasa [kmol/kmol de biomasa], para la tabla de resultados}

$n[1] = n_{h2}$   
 $n[2] = n_{co}$   
 $n[3] = n_{co2}$   
 $n[4] = n_{h2o}$   
 $n[5] = n_{ch4}$   
 $n[6] = n_{h2s}$   
 $n[7] = n_{n2}$   
 $n[8] = n_{o2}$

{Definicion de las fracciones molares en base humeda  $xn[i]$ }

$xn_{h2} = n_{h2}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{co} = n_{co}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{co2} = n_{co2}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{h2o} = n_{h2o}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{ch4} = n_{ch4}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{h2s} = n_{h2s}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{n2} = n_{n2}/n_{tot} * 100$   
 $xn_{o2} = n_{o2}/n_{tot} * 100$

{Definicion de las fracciones molares  $xn[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

$xn[1] = xn_{h2}$   
 $xn[2] = xn_{co}$   
 $xn[3] = xn_{co2}$   
 $xn[4] = xn_{h2o}$   
 $xn[5] = xn_{ch4}$   
 $xn[6] = xn_{h2s}$   
 $xn[7] = xn_{n2}$   
 $xn[8] = xn_{o2}$

{Definicion de las fracciones molares en base seca  $xn_{dry}[i]$ }

$xn_{bs\_h2} = n_{h2}/(n_{tot} - n_{h2o}) * 100$   
 $xn_{bs\_co} = n_{co}/(n_{tot} - n_{h2o}) * 100$   
 $xn_{bs\_co2} = n_{co2}/(n_{tot} - n_{h2o}) * 100$   
 $xn_{bs\_h2o} = 0$   
 $xn_{bs\_ch4} = n_{ch4}/(n_{tot} - n_{h2o}) * 100$

$$\begin{aligned} \text{xnbs\_h2s} &= \text{n\_h2s}/(\text{n\_tot}-\text{n\_h2o})*100 \\ \text{xnbs\_n2} &= \text{n\_n2}/(\text{n\_tot}-\text{n\_h2o})*100 \\ \text{xnbs\_o2} &= \text{n\_o2}/(\text{n\_tot}-\text{n\_h2o})*100 \end{aligned}$$

{Definicion de las fracciones molares en base seca  $\text{xndry}[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

$$\begin{aligned} \text{xndry}[1] &= \text{xnbs\_h2} \\ \text{xndry}[2] &= \text{xnbs\_co} \\ \text{xndry}[3] &= \text{xnbs\_co2} \\ \text{xndry}[4] &= \text{xnbs\_h2o} \\ \text{xndry}[5] &= \text{xnbs\_ch4} \\ \text{xndry}[6] &= \text{xnbs\_h2s} \\ \text{xndry}[7] &= \text{xnbs\_n2} \\ \text{xndry}[8] &= \text{xnbs\_o2} \end{aligned}$$

{Cantidades másicas de cada especie gaseosa en la mezcla de gases producido en el proceso de gasificación, en kg por kmol de biomasa [kg/kmol biomasa] }

$$\begin{aligned} \text{m\_h2} &= \text{n\_h2}*\text{molarmass}(\text{H2}) \\ \text{m\_co} &= \text{n\_co}*\text{molarmass}(\text{CO}) \\ \text{m\_co2} &= \text{n\_co2}*\text{molarmass}(\text{CO2}) \\ \text{m\_h2o} &= \text{n\_h2o}*\text{molarmass}(\text{H2O}) \\ \text{m\_ch4} &= \text{n\_ch4}*\text{molarmass}(\text{CH4}) \\ \text{m\_h2s} &= \text{n\_h2s}*\text{molarmass}(\text{HydrogenSulfide}) \\ \text{m\_n2} &= \text{n\_n2}*\text{molarmass}(\text{N2}) \\ \text{m\_o2} &= \text{n\_o2}*\text{molarmass}(\text{O2}) \end{aligned}$$

{Definicion de las masas  $\text{m}[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

$$\begin{aligned} \text{m}[1] &= \text{m\_h2} \\ \text{m}[2] &= \text{m\_co} \\ \text{m}[3] &= \text{m\_co2} \\ \text{m}[4] &= \text{m\_h2o} \\ \text{m}[5] &= \text{m\_ch4} \\ \text{m}[6] &= \text{m\_h2s} \\ \text{m}[7] &= \text{m\_n2} \\ \text{m}[8] &= \text{m\_o2} \\ \text{m\_tot} &= \text{m\_h2} + \text{m\_co} + \text{m\_co2} + \text{m\_h2o} + \text{m\_ch4} + \text{m\_h2s} + \text{m\_n2} + \text{m\_o2} \end{aligned}$$

{Definicion de las fracciones másicas en base humeda  $\text{xn}[i]$ }

$$\begin{aligned} \text{ym\_h2} &= \text{m\_h2}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_co} &= \text{m\_co}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_co2} &= \text{m\_co2}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_h2o} &= \text{m\_h2o}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_ch4} &= \text{m\_ch4}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_h2s} &= \text{m\_h2s}/\text{m\_tot}*100 \\ \text{ym\_n2} &= \text{m\_n2}/\text{m\_tot}*100 \end{aligned}$$



$$ym\_o2 = m\_o2/m\_tot*100$$

{Definicion de las fracciones másicas  $xn[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

```
ym[1]= ym_h2
ym[2]= ym_co
ym[3]= ym_co2
ym[4]= ym_h2o
ym[5]= ym_ch4
ym[6]= ym_h2s
ym[7]= ym_n2
ym[8]= ym_o2
```

{Definicion de las fracciones másicas en base seca  $xndry[i]$ }

```
ymbs_h2 = m_h2/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_co = m_co/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_co2 = m_co2/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_h2o = 0
ymbs_ch4 = m_ch4/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_h2s = m_h2s/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_n2 = m_n2/(m_tot-m_h2o)*100
ymbs_o2 = m_o2/(m_tot-m_h2o)*100
```

{Definicion de las fracciones másicas en base seca  $xndry[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

```
ymdry[1]= ymbs_h2
ymdry[2]= ymbs_co
ymdry[3]= ymbs_co2
ymdry[4]= ymbs_h2o
ymdry[5]= ymbs_ch4
ymdry[6]= ymbs_h2s
ymdry[7]= ymbs_n2
ymdry[8]= ymbs_o2
```

{Definicion de las masas  $m[i]$  de cada uno de los constituyentes del Syngas para la tabla de resultados}

```
m_m[1]= m_h2/PM_eq
m_m[2]= m_co/PM_eq
m_m[3]= m_co2/PM_eq
m_m[4]= m_h2o/PM_eq
m_m[5]= m_ch4/PM_eq
m_m[6]= m_h2s/PM_eq
m_m[7]= m_n2/PM_eq
m_m[8]= m_o2/PM_eq
m_m_tot= (m_h2 + m_co + m_co2 + m_h2o + m_ch4 + m_h2s + m_n2 + m_o2)/PM_eq
```

{Análisis de propiedades energeticas }

{Poder calorífico inferior de la biomasa en base seca en kJ/kg...expresión empírica.....}

$$\text{HHV} = (0,3491 * \text{fm\_C} + 1,1783 * \text{fm\_H} + 0,1005 * \text{fm\_S} - 0,1034 * \text{fm\_O} - 0,0151 * \text{fm\_N} - 0,0211 * \text{fm\_Ash}) * 100 * 1000 \text{ {en kJ/kg}}$$

$\Delta H_{\text{vap}} = \text{enthalpy\_vaporization}(\text{Water}; T = T_o) \text{ {kJ/kmol de agua}}$

$\text{hfg\_w} = \Delta H_{\text{vap}} / \text{molar mass}(\text{Water})$

$\text{LHV} = \text{HHV} - 9 * \text{fm\_H} * \text{hfg\_w} \text{ { poder calorífico inferior gravimétrico kJ/kg }}$

$\text{LHV}_{\text{bs}} = \text{LHV} \text{ { poder calorífico inferior gravimétrico en kJ/kg en base seca kJ/kg}}$

$\text{LHV}_{\text{mol\_bs}} = \text{LHV}_{\text{bs}} * \text{PM}_{\text{eq}} \text{ {Poder calorífico inferior molar de la biomasa en base seca} {en kJ/kmol comb equivalente}}$

$\text{LHV}_{\text{mol}} = \text{LHV} * \text{PM}_{\text{eq}}$

{Ecuación estequiométrica: Ecuación estequiométrica de combustión con aire  $r_{\text{air}}=1$ :



{entalpía molar de formación equivalente de la biomasa, necesaria para el balance de masa, tomada de la ecuación estequiométrica, en combustión completa @  $T_o, P_o$

$\text{LHV}_{\text{mol\_bs}} = (\text{HR} - \text{HP}) / 1 \text{ mol biomasa} = (\text{hfo\_biom} - (1 * \text{hfo\_co}_2 + u * \text{hfo\_h}_2\text{s} + x/2 * \text{hfo\_h}_2\text{o} + (z/2 + 3.76 * r_{\text{air}}) * \text{hfo\_n}_2)) / 1 \text{ mol biomasa}$

$(\text{hfo\_biom} = \text{LHV}_{\text{mol\_bs}} + (1 * \text{hfo\_co}_2 + u * \text{hfo\_h}_2\text{s} + x/2 * \text{hfo\_h}_2\text{o} + (z/2 + 3.76 * r_{\text{air}}) * \text{hfo\_n}_2))$

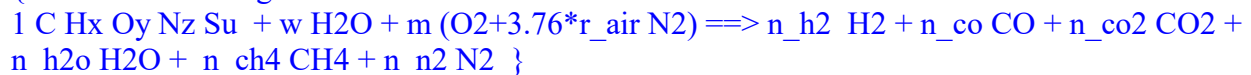
$$\text{hfo\_biom} = \text{LHV}_{\text{mol\_bs}} + (1 * \text{hfo\_co}_2 + u * \text{hfo\_h}_2\text{s} + x/2 * \text{hfo\_h}_2\text{o})$$

{-----  
-----}

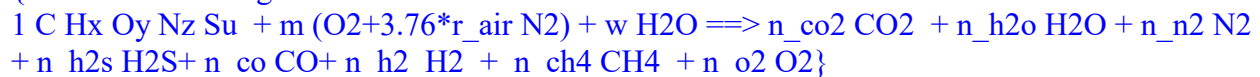
{Balance energía en el gasificador adiabático e isobarico  $H_{\text{Reactivos}}(T_o) \rightarrow$

$H_{\text{Prod\_gasif\_equilibrio}}(T) \}$

{Ecuación base de gasificación:



{Ecuación base de gasificación:



{Se Asume que los reactivos Biomasa y aire y/o agente gasificador entran al reactor a  $T_o=25^\circ\text{C}$  y  $P_o=101.325\text{kPa}$ }

HR= hfo\_biom+m\*hfo\_o2+m\*3,76\*r\_air\*hfo\_n2+w\*hfo\_h2o {Entalpia total de los reactivos @ To y Po}

HP = n\_co2\*h\_CO2 + n\_h2o\*h\_H2O + n\_n2 \*h\_N2 + n\_h2s \*h\_H2S+ n\_co \*h\_CO+ n\_h2 \*h\_H2 + n\_ch4 \*h\_CH4 + n\_o2 \*h\_O2

HR = HP

{-----  
-----}

{DATOS TERMODINÁMICOS DE LAS ESPECIES EN EL SYNGAS}

{entalpias de formacion de cada uno de las especies en los Productos asumidos como gases ideales}

{1} hfo\_h2 = **enthalpy\_formation**(H2)  
 {2} hfo\_co = **enthalpy\_formation**(CO)  
 {3} hfo\_co2 = **enthalpy\_formation**(CO2)  
 {4} hfo\_h2o = **enthalpy\_formation**(H2O)  
 {5} hfo\_ch4 = **enthalpy\_formation**(CH4)  
 {6} hfo\_h2s = **enthalpy\_formation**(H2S)  
 {7} hfo\_n2 = **enthalpy\_formation**(N2)  
 {8} hfo\_o2 = **enthalpy\_formation**(O2)

{entalpia estandar molar h° en la temperatura de referencia To para cada una de las especies se supone igual a la entalpia estandar de formación h°f}

{1} ho\_h2 = **enthalpy**(H2;T=To)  
 {2} ho\_co = **enthalpy**(CO;T=To)  
 {3} ho\_co2 = **enthalpy**(CO2;T=To)  
 {4} ho\_h2o = **enthalpy**(H2O;T=To)  
 {5} ho\_ch4 = **enthalpy**(CH4;T=To)  
 {6} ho\_h2s = **enthalpy**(H2S;T=To)  
 {7} ho\_n2 = **enthalpy**(N2;T=To)  
 {8} ho\_o2 = **enthalpy**(O2;T=To)

{Valor de la entalpia molar de los gases que componen el Syngas a la temperatura T[C]}

{1} h\_h2 = **enthalpy**(H2;T=T)  
 {2} h\_co = **enthalpy**(CO;T=T)  
 {3} h\_co2 = **enthalpy**(CO2;T=T)  
 {4} h\_h2o = **enthalpy**(H2O;T=T)  
 {5} h\_ch4 = **enthalpy**(CH4;T=T)  
 {6} h\_h2s = **enthalpy**(H2S;T=T)  
 {7} h\_n2 = **enthalpy**(N2;T=T)  
 {8} h\_o2 = **enthalpy**(O2;T=T)

{Cambio de la entalpía molar de cada uno de los componentes del syngas respecto a la del estado de referencia) }

{1} DELTAh\_h2 = h\_h2 - ho\_h2  
 {2} DELTAh\_co = h\_co - ho\_co

```

{3} DELTAh_co2 = h_co2 - ho_co2
{4} DELTAh_h2o = h_h2o - ho_h2o
{5} DELTAh_ch4 = h_ch4 - ho_ch4
{6} DELTAh_h2s = h_h2s - ho_h2s
{7} DELTAh_n2 = h_n2 - ho_n2
{8} DELTAh_o2 = h_o2 - ho_o2

```

```

{-----}
{-----}

```

{ANALISIS DE SEGUNDA LEY DE LA TERMODINAMICA }

{energías libres de Gibbs de formación de los compuestos Tok=298k, Po=101.325kPa}  
 {Datos de energia libre de gibbs de las sustancias tomados de  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Standard\\_enthalpy\\_of\\_formation](https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_enthalpy_of_formation)}

```

{1} gfo_h2 = 0 [kJ/kmol]
{2} gfo_co = -137160[kJ/kmol]
{3} gfo_co2 = -394390[kJ/kmol]
{4} gfo_h2o = -228600[kJ/kmol]
{5} gfo_ch4 = -50500[kJ/kmol]
{6} gfo_h2s = -33830[kJ/kmol]
{7} gfo_n2 = 0[kJ/kmol]
{8} gfo_o2 = 0[kJ/kmol]

```

{entropías de formación de los compuestos s<sup>o</sup>f }

```

{1} sfo_h2 = 0 {(hfo_h2 - gfo_h2)/298.15}
{2} sfo_co = (hfo_co - gfo_co)/298,15
{3} sfo_co2 = (ho_co2-gfo_co2)/298,15
{4} sfo_h2o = (ho_h2o-gfo_h2o)/298,15
{5} sfo_ch4 = (hfo_ch4-gfo_ch4)/298,15
{6} sfo_h2s = (hfo_h2s-gfo_h2s)/298,15
{7} sfo_n2 = 0 {(hfo_n2 - gfo_n2)/298.15}
{8} sfo_o2 = 0 {(hfo_o2 - gfo_o2)/298.15}

```

{entropias en el estandar en el estado de referencia (Tok=298.15K,Po=101.325kPa,,)}

```

{1} so_h2 = entropy(H2;T=To;P=101,325)
{2} so_co = entropy(CO;T=To;P=101,325)
{3} so_co2 = entropy(CO2;T=To;P=101,325)
{4} so_h2o = entropy(H2O;T=To;P=101,325)
{5} so_ch4 = entropy(CH4;T=To;P=101,325)
{6} so_h2s = entropy(H2S;T=To;P=101,325)
{7} so_n2 = entropy(N2;T=To;P=101,325)
{8} so_o2 = entropy(O2;T=To;P=101,325)

```

{entropias en el estandar en el estado de salida del Syn (Tk,Po=101.325kPa,,)}

```

{1} s_h2 = entropy(H2;T=T;P=101,325)
{2} s_co = entropy(CO;T=T;P=101,325)

```

```

{3} s_co2 = entropy(CO2;T=T;P=101,325)
{4} s_h2o = entropy(H2O;T=T;P=101,325)
{5} s_ch4 = entropy(CH4;T=T;P=101,325)
{6} s_h2s = entropy(H2S;T=T;P=101,325)
{7} s_n2 = entropy(N2;T=T;P=101,325)
{8} s_o2 = entropy(O2;T=T;P=101,325)

```

{Energías libres de Gibbs estandar en el estado de salida del Syn (Tk,Po=101.325kPa)  
con referencia a la energia libre de gibbs de fornacion std como productos formados en condicione  
a (To,Po)

```

g(T) = h(T) - T*s(T) ==> g(T) = h°f + [ h(T)-h(To) ] - Tk* [s°f + ( s(T) - s(To) ) ]
{1} go_h2_T = hfo_h2 + (h_h2 - ho_h2) - Tk* ( sfo_h2 + (s_h2-so_h2) )
{2} go_co_T = hfo_co + (h_co - ho_co) - Tk* ( sfo_co + (s_co-so_co) )
{3} go_co2_T = hfo_co2 + (h_co2 - ho_co2) - Tk* ( sfo_co2 + (s_co2-so_co2) )
{4} go_h2o_T = hfo_h2o + (h_h2o - ho_h2o) - Tk* ( sfo_h2o + (s_h2o-so_h2o) )
{5} go_ch4_T = hfo_ch4 + (h_ch4 - ho_ch4) - Tk* ( sfo_ch4 + (s_ch4-so_ch4) )
{6} go_h2s_T = hfo_h2s + (h_h2s - ho_h2s) - Tk* ( sfo_h2s + (s_h2s-so_h2s) )
{7} go_n2_T = hfo_n2 + (h_n2 - ho_n2) - Tk* ( sfo_n2 + (s_n2-so_n2) )
{8} go_o2_T = hfo_o2 + (h_o2 - ho_o2) - Tk* ( sfo_o2 + (s_o2-so_o2) )

```

```

{-----}
{-----}
{Calculo del poder calorífico inferior del syngas}
{La reacción de combustión completa para calcular el LHV del syngas es}
{n_h2 + n_co + n_co2 + n_h2o + n_ch4 + n_n2 + n_o2 + at_c (O2 + 3,76*N2) -----> a
CO2 + b H2O + c N2}

```

```

{Balances de la combustión completa }
{1 O} n_co + 2*n_co2 + n_h2o + 2*at_c = 2*a + b
{2 H} 2*n_h2 + 4*n_ch4 + 2*n_h2o = 2*b
{3 N} n_n2 + 3,76*at_c = c
{4 C} n_co + n_co2 + n_ch4 = a

```

```

{Se calculan las energías de las entradas y las salidas}
Hr_c= (n_h2 *hfo_h2) + (n_co*hfo_co) + (n_co2*hfo_co2) + (n_h2o*hfo_o2) +
(n_ch4*hfo_ch4) + (n_h2s*hfo_h2s) + (n_n2*hfo_n2) + (n_o2*hfo_o2)
Hp_c= (a*hfo_co2) + (b*hfo_h2o) + (c*hfo_n2)
Tn= 273,15[C]
vn_tot= (n_tot*Ru*Tn)/po
LHV_syngas =((Hr_c - Hp_c))/(vn_tot)
HHV_syngas= LHV_syngas + (b*enthalpy_vaporization(Water;T=To)/vn_tot)

```

```

{Eficiencia en frio del proceso de gasificación tomada de Basu}
{La ecuación para esta eficiencia es ncg=(LHV_syngas*v_tot)/(LHVk*fm_tot)}
ncg = (LHV_syngas*vn_tot)/(LHV*fm_tot*PM_eq)*100
v_tot= (vn_tot*Tok)/(Tn)

```

